

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局(43) 国際公開日
2006年10月5日 (05.10.2006)

PCT

(10) 国際公開番号
WO 2006/104226 A1

(51) 国際特許分類:

C07D 223/18 (2006.01) C07C 229/36 (2006.01)
C07D 487/10 (2006.01) C07C 249/02 (2006.01)
C07D 498/10 (2006.01) C07C 251/24 (2006.01)
C07D 513/10 (2006.01) B01J 31/02 (2006.01)
C07C 227/04 (2006.01) C07B 53/00 (2006.01)
C07C 227/32 (2006.01) C07B 61/00 (2006.01)

ンター内 Hyogo (JP). 山本 憲一郎 (YAMAMOTO, Kenichiro) [JP/JP]; 〒6512241 兵庫県神戸市西区室谷2丁目2番3号 長瀬産業株式会社 研究開発センター内 Hyogo (JP).

(74) 代理人: 南條 博道 (NANJO, Hiromichi); 〒5300047 大阪府大阪市北区西天満3丁目2番9号 翁ビル5階 Osaka (JP).

(21) 国際出願番号: PCT/JP2006/306791

(22) 国際出願日: 2006年3月24日 (24.03.2006)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:

特願2005-094873 2005年3月29日 (29.03.2005) JP

(71) 出願人 (米国を除く全ての指定国について): 長瀬産業株式会社 (NAGASE & CO., LTD.) [JP/JP]; 〒5508668 大阪府大阪市西区新町1丁目1番17号 Osaka (JP). 国立大学法人京都大学 (KYOTO UNIVERSITY) [JP/JP]; 〒6068501 京都府京都市左京区吉田本町3番地1 Kyoto (JP).

(72) 発明者: および

(75) 発明者/出願人 (米国についてのみ): 丸岡 啓二 (MARUOKA, Keiji) [JP/JP]; 〒6068502 京都府京都市左京区北白川追分町 国立大学法人京都大学大学院理学研究科内 Kyoto (JP). 西本 幸史 (NISHIMOTO, Yukifumi) [JP/JP]; 〒6512241 兵庫県神戸市西区室谷2丁目2番3号 長瀬産業株式会社 研究開発セ

(81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PG, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, SY, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LS, MW, MZ, NA, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, NL, PL, PT, RO, SE, SI, SK, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

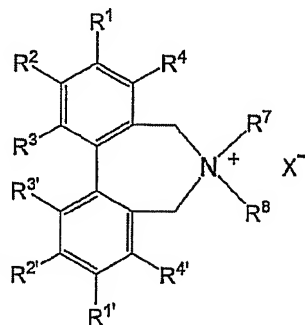
添付公開書類:

— 国際調査報告書

2文字コード及び他の略語については、定期発行される各PCTガゼットの巻頭に掲載されている「コードと略語のガイダンスノート」を参照。

(54) Title: OPTICALLY ACTIVE QUATERNARY AMMONIUM SALT HAVING AXIAL ASYMMETRY AND PROCESS FOR PRODUCING α -AMINO ACID AND DERIVATIVE THEREOF WITH THE SAME

(54) 発明の名称: 軸不斉を有する光学活性な4級アンモニウム塩およびそれを用いた α -アミノ酸およびその誘導体の製造方法



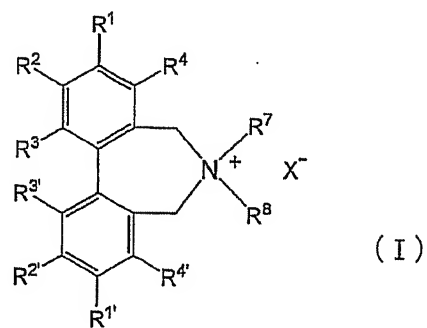
(I)

(57) Abstract: A chiral phase-transfer catalyst represented by the following formula (I). (I) The compound (I) can be produced by reacting 1,1'-biphenyl 2,2'-dimethylenebromide derivative which can be produced through a relatively small number of steps with an easily available secondary amine.



(57) 要約:

本発明は、以下の式 (I) のキラル相間移動触媒：



を提供する。この化合物 (I) は、比較的少ない工程で製造可能な 2, 2'-ジメチレンプロミド-1, 1'-ビフェニル誘導体と、入手が容易な 2 級アミンとを反応させることにより、製造できる。

明 細 書

軸不斉を有する光学活性な4級アンモニウム塩およびそれを用いた
 α -アミノ酸およびその誘導体の製造方法

5

技術分野

本発明は、軸不斉を有する光学活性な4級アンモニウム塩およびその製造方法に関する。本発明はさらに、この軸不斉を有する光学活性な4級アンモニウム塩を相間移動触媒として用いた光学活性な α -アミノ酸およびその誘導体の製造方法に関する。

10

背景技術

式 $H_2NCH(R)COOH$ で表される α -アルキル- α -アミノ酸は、天然に存在する非常に重要な α -アミノ酸である。 α 炭素がL配置を有する α -アルキル- α -アミノ酸は、動物、植物、微生物などに存在するタンパク質（ポリペプチド鎖）の構成成分である。また、 α -アルキル- α -アミノ酸のD体は、植物、菌類、および微生物に非タンパク性化合物の構成成分として存在する。他方、 α , α -ジアルキル- α -アミノ酸は、立体化学的に安定であること、ペプチドに組込まれるとプロテアーゼによる酵素加水分解を受けにくいことなど、その固有の機能によって近年注目されている（Bellier, B.ら、J. Med. Chem., 1997年, 40巻, p.3947およびMossel, E.ら、Tetrahedron Asymmetry, 1997年, 8巻, p.1305参照）。そして、このような特性から、 α , α -ジアルキル- α -アミノ酸は、増強された活性を有するペプチド、有効な酵素インヒビター、および種々の生物学的活性を有する化合物を合成するためのキラルビルディングブロックなどとして利用が考えられる。このような非タンパク性の α -アミノ酸、特に α , α -ジアルキル

15

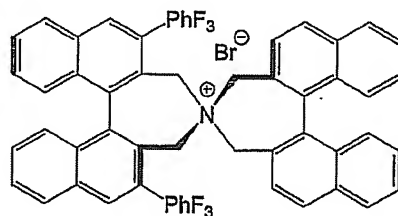
20

25

— α —アミノ酸については、 α 炭素の立体化学を選択的に構築する合成方法が検討されてきたが、いまだに実用的方法は見出されていない。

グリシン誘導体の立体選択的アルキル化を可能にするキラル相間移動触媒は、利用し易いことおよびその適用範囲が広いことから、プロセス化学の分野で重要性が高まっている。そして、主としてシンコナアルカロイド誘導体を使用して、相間移動触媒の設計についての多くの研究が行われ、すでにいくつかの有用な方法が報告されている（例えば、Shioiri, T.ら、Stimulating Concepts in Chemistry, Vogtle, F.ら編, WILEY-VCH:Weinheim, 2000年, p.123、およびO'Donnell, M.J.、Aldrichimica Acta, 2001年, 34巻, p.3参照）。しかし、このような相間移動触媒を用いた反応では、ハロゲン系溶媒を使用すること、反応に長時間を要すること、低温条件が必要であることなどの種々の問題があった。特に、上記の α , α —ジアルキル— α —アミノ酸の合成では、このようなシンコナアルカロイドに由来するキラル相間移動触媒の使用は、あまり効率的とはいえない。

本発明者らは、軸不斉を有する光学活性な4級アンモニウム塩を調製し、 α —アルキル— α —アミノ酸および α , α —ジアルキル— α —アミノ酸を立体選択的に合成する相間移動触媒として利用できることを明らかにした（特開2001-48866号公報、特開2003-81976号公報、およびOoi, T.ら、J. Am. Chem. Soc., 2000年, 122巻, p.5228参照）。例えば、以下の式：



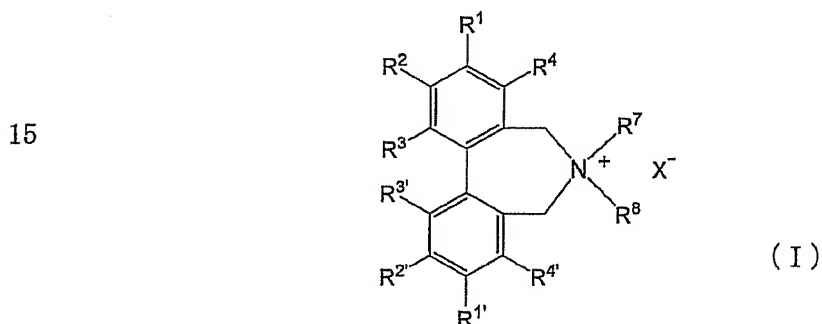
（ここで、 PhF_3 は3, 4, 5—トリフルオロフェニル基を表す）
で表されるスピロ型の化合物は、グリシン誘導体の立体選択的二重アルキル

化および α -アルキル- α -アミノ酸誘導体の立体選択的モノアルキル化を触媒するため、 α , α -ジアルキル- α -アミノ酸の立体選択的な製造に非常に有効である。しかし、このようなスピロ型触媒の調製には、多くの工程が必要であり、例えば、入手が容易なキラルピナフトールを出発原料とする場合、この触媒の構造の左側半分を調製するだけでも11工程を要する。このように、従来の軸不斉を有する光学活性な4級アンモニウム塩は、調製に非常に手間がかかり、コスト高となることが欠点である。

発明の開示

本発明は、構造が単純で、より少ない工程で製造可能なキラル相間移動触媒を提供することを目的とする。

本発明は、以下の式(I)で表される化合物を提供する：



(ここで、

20 R^1 , $R^{1'}$, R^2 , および $R^{2'}$ は、それぞれ独立して、

水素原子であるか；

ハロゲン原子であるか；

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基である

25 か；あるいは

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および

／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

R^3 および $R^{3'}$ は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子であるか；

- 5 ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基であるか；あるいは

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

10

R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

(i)水素原子；

(ii) $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）

15

(iii)シアノ基；

(iv)ニトロ基；

(v)カルバモイル基；

(vi) $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；

20

(vii) $N, N\text{-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；

(viii) $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）；

(ix)ハロゲン原子；

(x)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_6$ のアルキル基；

25

(xi)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい

てもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；

(xii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；

(xiii)アラルキル基であって、ここで、該アラルキル基を構成するアリー
5 ル部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$
アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$
アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい
てもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} およ
び R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換され
ていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキ
15 ル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していても
よくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
で置換されていてもよい、アリアル基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素
20 原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か
である）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

25 N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で

置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基;

- 5 (xiv)ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、ここで、該ヘテロアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

- 10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、
15 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 25 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、
 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；

5

(xv) アリール基であって、ここで、該アリール基が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅

10

アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、

15

N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、N、N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、または—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20

—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

25

N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

N、N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

- 5 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいか、あるいは3, 4位が一緒になって—O—(CH₂)_p—O—（ここで、pは1または2である）で置換されていてもよい、アリール基；

(xvi)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

- 10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
15 N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、N, N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、または—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

- 20 シアノ基、

—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

- 25 カルバモイル基、

N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および
ハロゲン原子

- 5 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基; ならびに

(xvii) $-S(O)_n-R$ (ここで、 n は0、1、または2であり、そして R は分岐していてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である);

からなる群より選択される基であり、

- 10 R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、

(i) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基;

(ii) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_{12}$ のアルケニル基;

- 15 (iii) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_{12}$ のアルキニル基;

(iv) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

- 20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されて

- 25 いてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル)

- ル) カルバモイル基、または $\text{-NHCO}R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、
- シアノ基、
- 5 $\text{-NR}^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基かである)、
- ニトロ基、
- カルバモイル基、
- 10 $\text{N-}(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、
- $\text{N, N-ジ}(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、
- $\text{-NHCO}R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である)、および
- ハロゲン原子
- 15 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；
- (v)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が
- 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基、
- 20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_5$ アルコキシ基、
- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $\text{-NR}^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されて
- 25 いてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、
- $\text{N-}(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、 $\text{N, N-ジ}(C_1\sim C_4\text{アルキル})$

ル) カルバモイル基、または $-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 5 $-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 10 $\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、
 $\text{N}, \text{N}-\text{ジ}(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、
 $-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基である)、および
ハロゲン原子

- 15 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

(vi) $-(\text{CH}_2)_n \text{OCONR}^{10}\text{R}^{11}$ (ここで、 R^{10} および R^{11} はそれぞれ独立して、

(1) 水素原子、

- 20 (2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、

(3) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ のアルケニル基；

- (4) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $\text{C}_2 \sim \text{C}_6$ のアルキニル基；

(5) アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分

が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、 N,N -ジ $(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

20 $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

N,N -ジ $(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基である）、および

ハロゲン原子

25 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基；

(6)ヘテロアリール部分を有するヘテロラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

15 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

20 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

25 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、へ

テロアラルキル基；

(7) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基； N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

15 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

 ニトロ基、

20 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

25 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

リール基、ならびに

(8)ヘテロアリール基であつて、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基； N ， N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

15 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

20 カルバモイル基、

$N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

N ， N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である）、および

25 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、へ

テロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(vii) - (CH₂)_nCONR¹²R¹³ (ここで、R¹²およびR¹³はそれぞれ独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N-(C₁~C₄アルキル)カルバモイル基; N, N-ジ(C₁~C₄アルキル)カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、

ニトロ基、

- カルバモイル基、
 N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
 N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
 -NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子
 5 子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および
 ハロゲン原子
 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに
 (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が
 10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
 ~C₄アルキル基、
 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
 ~C₅アルコキシ基、
 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
 15 いてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰
 およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
 されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
 基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄ア
 ルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐してい
 てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基であ
 20 る)で置換されていてもよい、アリール基、
 シアノ基、
 -NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、
 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル
 25 基かである)、
 ニトロ基、

- カルバモイル基、
- N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
- N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
- NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子
- 5 子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および
- ハロゲン原子
- からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である
- 10 る) ;
- (viii) - (CH₂)_nNR¹²COR¹³ (ここで、R¹²およびR¹³はそれぞれ独立して、
- (1)水素原子、
- (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
- 15 ~C₄アルキル基、
- (3)アリール基であって、該アリール基が
- 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
- ~C₄アルキル基、
- 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
- 20 ~C₅アルコキシ基、
- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
- いてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰
- およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
- されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
- 25 基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基 ; N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐してい

てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、

5 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

10 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

15 リール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐してい

25

てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 5 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

- 10 $N, N\text{-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

- からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ
15 テロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(ix) $-(CH_2)_nNR^{12}R^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

- 20 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

- 25 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

～C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁

～C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である）；

(x) $-(CH_2)_nY-OR^{12}$ （ここで、Yは分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄の二価の飽和炭化水素基であり、

R^{12} は、

(1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

5 (3) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基; N , N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

25 N , N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

5 (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基; N , N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

25 N , N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

5 からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(xi) $-(CH_2)_n-OR^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

10 $\sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1
 $\sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

15 $\sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
 いてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30}
 および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
 されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
 20 基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N , N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$
 カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐してい
 てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基であ
 る)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

25 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、
 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル

基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

5 N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

10 リール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

25 -NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル

基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

5 N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ

10 テロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(xii) - (CH₂)_n - S - R¹² (ここで、R¹²は、

(1)水素原子、

15 (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基 ; N, N-ジ (C₁~C₄ア

25

ルキル) カルバモイル基、または -NHCOR^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 5 $\text{-NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 10 $\text{N- (C}_1\sim\text{C}_4\text{アルキル) カルバモイル基、}$
 $\text{N, N-ジ (C}_1\sim\text{C}_4\text{アルキル) カルバモイル基、}$
 -NHCOR^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基である)、および
 ハロゲン原子

- 15 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基、

- 20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基、シアノ基、 $\text{-NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $\text{N- (C}_1\sim\text{C}_4\text{アルキル) カルバモイル基； N, N-ジ (C}_1\sim\text{C}_4\text{ア}$

25

ルキル) カルバモイル基、または $\text{-NHCO}R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 5 $\text{-NR}^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 10 $\text{N-}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$\text{N, N-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$\text{-NHCO}R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

- 15 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(xiii) $\text{-(CH}_2)_n\text{-SO-}R^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

- 20 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

- 25 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

～C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

10 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

15 カルバモイル基、

N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

20 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

25 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁

～C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である）；ならびに

(xiv) $-(CH_2)_n-SO_2-R^{12}$ （ここで、R¹²は、

(1)水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、

(3) アリール基であって、該アリール基が

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_5 アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基; N , N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

15 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基かである)、

20 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

N , N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

25 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基である)、および
ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N-（C₁~C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁~C₄アルキル）カルバモイル基、または-NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

-NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-（C₁~C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁~C₄アルキル）カルバモイル基、

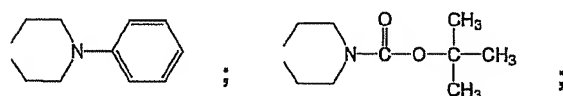
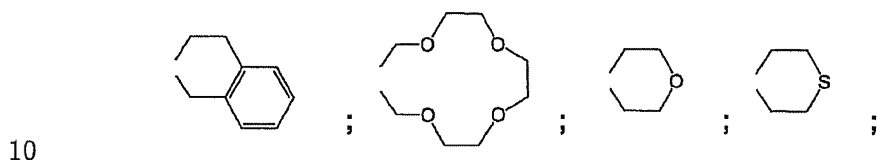
-NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である）、およびハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

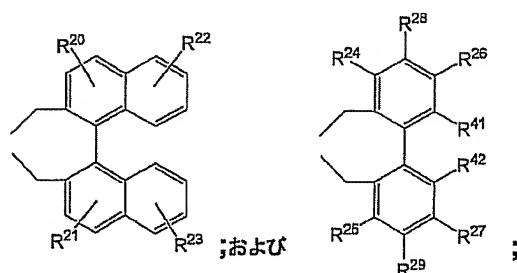
からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

5 からなる群より選択される基であるか、あるいは、

R^7 および R^8 は一緒になって、 $-(CH_2)_m-$ (ここで、mは2から8の整数である) ;



15



20 (ここで、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{41} 、および R^{42} はそれぞれ独立して、

水素原子 ;

分岐または環を形成していてもよく、および/またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基 ;

25 分岐または環を形成していてもよく、および/またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル基 ;

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル基；

5 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ のアルキル基で置換されていてもよいアリール基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、
10 アリール基；

 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1
15 $\sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール部分を有する、ヘテロアリール基；

 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1
20 $\sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール部分を有する、アラルキル基；

25 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン

原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール部分を有する、ヘテロアラルキル基；

($C_1 \sim C_3$ アルコキシ) カルボニル基；

カルバモイル基；

N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基；ならびに

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基（ここで、 $C_1 \sim C_4$ アルキル基は、互いに同じでも異なってもよい）からなる群より選択される基である）

からなる群より選択される二価の基を表し、そして

X^- は、ハロゲン化物アニオン、 SCN^- 、 HSO_4^- 、 HF_2^- 、 $CF_3SO_3^-$ 、 $CH_3-Ph-SO_3^-$ 、および $CH_3SO_3^-$ からなる群より選択されるアニオンである）である）。

1つの実施態様では、上記式（I）で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべては、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基である。

1つの実施態様では、上記式（I）で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべてはメトキシ基、エトキシ基、またはベンジルオキシ基である。

1つの実施態様では、上記式（I）で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

水素原子；ならびに

アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$

アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$
アルコキシ基、

5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい
もよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} およ
び R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換され
ていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、カルバモイル基、 $N-(C_1$
 $\sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、 N,N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバ
モイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハ
10 ロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換され
ていてもよい、アリール基、

シアノ基、

15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素
原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か
である）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

N,N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で
置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア
リール基；

25 からなる群より選択される基である。

さらなる実施態様では、上記式（I）で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$

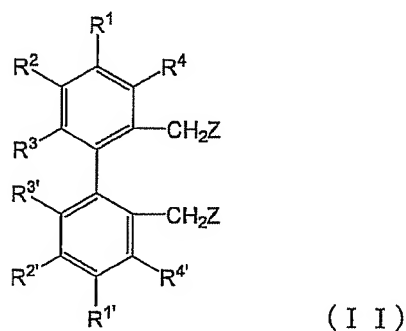
は3, 4, 5-トリフルオロフェニル基または3, 5-ビストリフルオロメチルフェニル基である。

1つの実施態様では、上記式(I)で表される化合物の R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基である。

さらなる実施態様では、上記式(I)で表される化合物の R^7 および R^8 はともにn-ブチル基である。

本発明はまた、上記式(I)で表される化合物を製造するための方法を提供し、該方法は、

以下の式(II)：



で表される化合物を、有機溶媒中、酸捕捉剤の存在下にて、
以下の式(III)：



で表される2級アミンと反応させる工程、を包含し、
ここで、式(II)において、

R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、および $R^{2'}$ は、それぞれ独立して、

水素原子であるか；

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および
／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基である
か；あるいは

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

R^3 および $R^{3'}$ は、それぞれ独立して、

5 ハロゲン原子であるか；

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基であるか；あるいは

10 ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

(i)水素原子；

15 (ii) $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）；

(iii)シアノ基；

(iv)ニトロ基；

(v)カルバモイル基；

20 (vi) $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；

(vii) N,N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；

(viii) $-NHCO R^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）；

(ix)ハロゲン原子；

25 (x)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_6$ のアルキル基；

(xi)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；

(xii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；

5 (xiii)アラルキル基であって、ここで、該アラルキル基を構成するアリアル部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
15 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリアル基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

25 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、
 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基;

5

(xiv)ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、ここで、該ヘテロアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、

10

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、シアノ基、 $-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、
15 $\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ $(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

20

シアノ基、

$-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

25

カルバモイル基、

$\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、
 $-NHCO R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で
 置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および
 ハロゲン原子

- 5 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ
 テロアラルキル基;

(xv) アリール基であって、ここで、該アリール基が、
 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$
 アルキル基、

- 10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$
 アルコキシ基、

- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい
 てもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} およ
 び R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換され
 15 ていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、
 N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキ
 ル) カルバモイル基、または $-NHCO R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していても
 よくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)
 で置換されていてもよい、アリール基、

- 20 シアノ基、
 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素
 原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か
 である)、

- ニトロ基、
 25 カルバモイル基、

N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

- 5 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、あるいは3, 4位が一緒になって-O- (CH₂)_p-O- (ここで、pは1または2である) で置換されていてもよい、アリール基;

(xvi)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

- 10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

- 15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)
- 20 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、

- 25 ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

5 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；ならびに

(xvii) -S (O)_n-R (ここで、nは0、1、または2であり、そしてRは分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) ；

10

からなる群より選択される基であり、そして

Zはハロゲン原子であり、

そして式 (I I I) において、

R⁷およびR⁸はそれぞれ独立して、

15

(i) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₁~C₃₀のアルキル基；

(ii) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂~C₁₂のアルケニル基；

(iii) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂~C₁₂のアルキニル基；

20

(iv) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅

25

アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい

もよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
5 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

10 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

15 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

20 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；

(v)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

25 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい

もよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ

テロアリール基；

(vi) $-(CH_2)_n OCONR^{10}R^{11}$ （ここで、 R^{10} および R^{11} はそれぞれ独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

$\sim C_4$ アルキル基、

(3)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換され

ていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；

(4)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；

(5)アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

25 N 、 N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基;

- 5 (6)ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

- 10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、
 15 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 25 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、
 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；

5

(7)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

10

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N—（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N—ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

15

シアノ基、

—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

20

ニトロ基、

カルバモイル基、

N—（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

25

N，N—ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

$-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

5 リール基、ならびに

(8)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、

10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、シアノ基、 $-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、
15 $\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4\text{アルキル})$ カルバモイル基； N 、 $\text{N}-\text{ジ}(\text{C}_1 \sim \text{C}_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

25 $\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 $\text{N}-\text{ジ}(\text{C}_1 \sim \text{C}_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

—NHCO R^9 （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、へ

5 テロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である）；

(vii)—(CH $_2$) $_n$ CON R^{12} R^{13} （ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

10 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、—N R^{30} R^{31} （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N—($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基；N，N—ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または—NHCO R^9 （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

25 シアノ基、

—N R^{30} R^{31} （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、

水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

5 N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

10 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または-NHCO R^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

25 シアノ基、

-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、

水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

5 N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

10 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(viii) - (CH_2)_nNR¹²CO R^{13} (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ

15 独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

25 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換

されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

10 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換

されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

10 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(ix) $-(CH_2)_nNR^{12}R^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

25 $\sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_5 アルコキシ基、

- 5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 15 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

- 20 N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基である)、および

ハロゲン原子

- 25 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- 5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基； N, N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、
- 10

シアノ基、

- $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、
- 15 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

- 20 N, N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

- からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- 25

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数であ

る) ;

(x) — (CH₂)_nY—OR¹² (ここで、Yは分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄の二価の飽和炭化水素基であり、R¹²は、

5 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、—NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基; N, N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、または—NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

—NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである)、

25 ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

5 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

20 シアノ基、

-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、

25 ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

5 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

10 (xi) - (CH₂)_n - OR¹² (ここで、R¹²は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて

20 いてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰

およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル

基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄ア

ルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐してい

25 てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

5 ニトロ基、

カルバモイル基、

N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

10 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

20 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

25

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

5 ニトロ基、

カルバモイル基、

N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

10 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

15 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(xii) $-(CH_2)_n-S-R^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

20 (3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

25 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30}

および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、およびハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30}

および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
 されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
 基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N 、 N -ジ($C_1 \sim C_4$ ア
 ルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐してい
 てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基であ
 る)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、
 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル
 基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原
 子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ
 テロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数であ
 る) ;

(xiii) $-(CH_2)_n-SO-R^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

$\sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- 5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基； N 、 N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

- 20 N 、 N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

25

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- 5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基； N 、 N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

- 20 N 、 N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

- 25 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数であ

る) ; ならびに

(xiv) $-(\text{CH}_2)_n-\text{SO}_2-\text{R}^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

5 $\sim \text{C}_4$ アルキル基、

(3) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

$\sim \text{C}_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

10 $\sim \text{C}_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて

いてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、シアノ基、 $-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30}

および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換

されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル

15 基、 $\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基； N ， N -ジ ($\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ ア

ルキル) カルバモイル基、または $-\text{NHCOR}^9$ (ここで、 R^9 は分岐してい

てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基であ

る) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-\text{NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、

水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル

基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

25 $\text{N}-(\text{C}_1 \sim \text{C}_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

N ， N -ジ ($\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル) カルバモイル基、

—NHCO R^9 （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

5

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

10

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

15

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、—NR 30 R 31 （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N—($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基；N，N—ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または—NHCO R^9 （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20

—NR 30 R 31 （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

25

N—($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

N，N—ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ

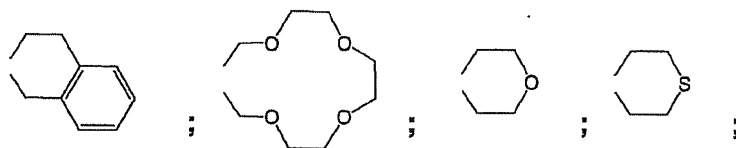
5 テロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である）；

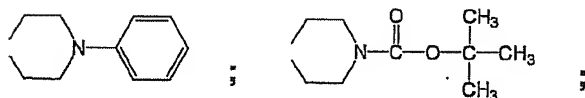
からなる群より選択される基であるか、あるいは、

R⁷およびR⁸は一緒になって、—(CH₂)_m—（ここで、mは2から8の

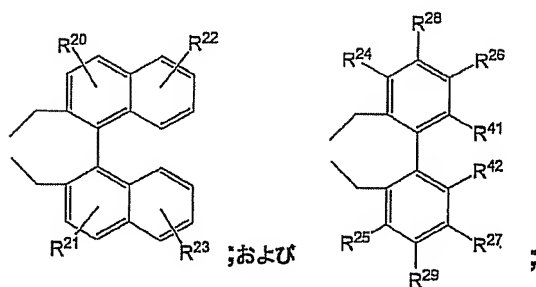
10 整数である）；



15



20



（ここで、R²⁰、R²¹、R²²、R²³、R²⁴、R²⁵、R²⁶、R²⁷、R²⁸、R²⁹、R⁴¹、およびR⁴²はそれぞれ独立して、

25

水素原子；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換

されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル基；

5 分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル基；

ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ のアルキル基で置換されていてもよいアリール基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール基；

10

ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

15

ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール部分を有する、アラルキル基；

20

25

- ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリアル部分を有する、ヘテロラルキル基；

($C_1 \sim C_3$ アルコキシ) カルボニル基；

カルバモイル基；

- 10 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；ならびに

N, N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基（ここで、 $C_1 \sim C_4$ アルキル基は、互いに同じでも異なってもよい）からなる群より選択される基である）

からなる群より選択される二価の基を表す。

- 15 1つの実施態様では、上記式 (I I) で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべては、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基である。

- 1つの実施態様では、上記式 (I I) で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべてはメトキシ基、エトキシ基、またはベンジルオキシ基である。

- 1つの実施態様では、上記式 (I I) で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

水素原子；ならびに

アリアル基であって、該アリアル基が

- 25 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
10 で置換されていてもよい、アリール基、

 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

15 ニトロ基、

 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

 ハロゲン原子

 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；

 からなる群より選択される基である。

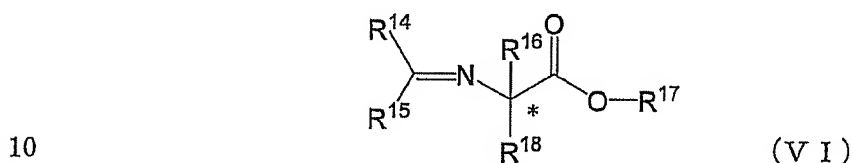
25 さらなる実施態様では、上記式（I I）で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$ は3, 4, 5-トリフルオロフェニル基または3, 5-ビストリフルオロ

メチルフェニル基である。

1つの実施態様では、上記式 (I I I) で表される化合物の R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基である。

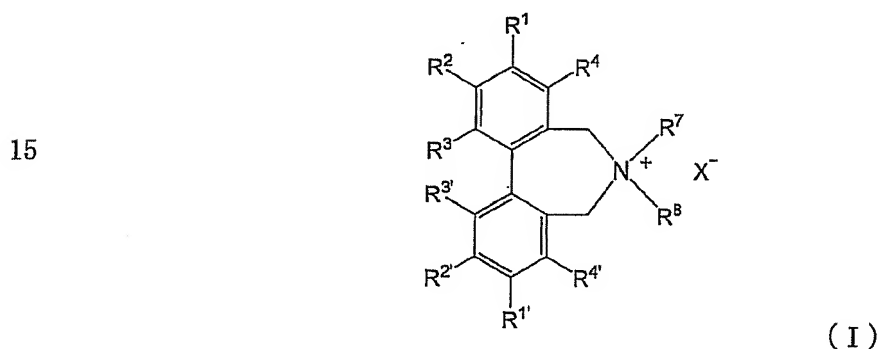
5 さらなる実施態様では、上記式 (I I I) で表される化合物の R^7 および R^8 はともに n -ブチル基である。

本発明はまた、式 (V I) で表される化合物：



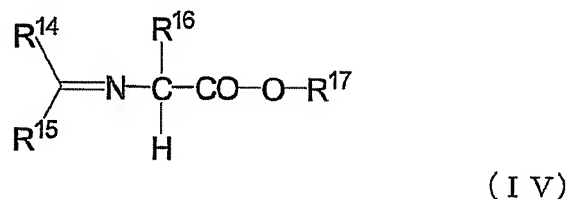
を立体選択的に製造するための方法を提供し、該方法は、

軸不斉に関して純粋な式 (I)：



で表される化合物を相間移動触媒として用い、式 (I V) で表される化合

20 物：



を、媒体中、無機塩基の存在下、式 (V) の化合物：

25



でアルキル化する工程、を包含し、

ここで、式 (I) において、

R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、および $R^{2'}$ は、それぞれ独立して、

水素原子であるか；

5 ハロゲン原子であるか；

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基であるか；あるいは

10 ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

R^3 および $R^{3'}$ は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子であるか；

15 ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基であるか；あるいは

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

20 R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

(i)水素原子；

(ii) $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)；

25 (iii)シアノ基；

(iv)ニトロ基；

- (v) カルバモイル基；
- (vi) $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基；
- (vii) $N, N\text{-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基；
- (viii) $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) ；
- (ix) ハロゲン原子；
- (x) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_6$ のアルキル基；
- (xi) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；
- (xii) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；
- (xiii) アラルキル基であって、ここで、該アラルキル基を構成するアリール部分が、
- 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、
- 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、
- ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、 $N, N\text{-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

5 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N,N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

10 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アルキル基；

15 (xiv)ヘテロアリール部分を有するヘテロアルキル基であって、ここで、該ヘテロアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

20 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N,N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)

25

で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

5 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-($C_1\sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

N, N-ジ($C_1\sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

10 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；

15 (xv)アリール基であって、ここで、該アリール基が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_5$ アルコキシ基、

20 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N-($C_1\sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、N, N-ジ($C_1\sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である)

25

で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

5 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

10 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよいか、あるいは3, 4位が一緒になって $-O-(CH_2)_p-O-$ (ここで、 p は1
15 または2である)で置換されていてもよい、アリール基;

(xvi)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、

25 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していても

よくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)
で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

5 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素
原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か
である)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

10 $N,N\text{-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で
置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ
15 テロアリール基；ならびに

(xvii) $-S(O)_n-R$ (ここで、 n は0、1、または2であり、そして
 R は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$
アルキル基である)；

からなる群より選択される基であり、

20 R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、一価の有機基であるか、あるいは一緒に
なって二価の有機基を表し、

X^- は、ハロゲン化物アニオンであり、

式(IV)および式(VI)において、

R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して、

25 (i)水素原子；あるいは

(ii)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- 5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
 10 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

- 20 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

- からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；であり、ただし R^{14} および R^{15} がともに水素原子である場合を除き、
- 25

R^{16} は、

(i)水素原子；

(ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{10}$ のアルキル基であって、該アルキル基が、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$

アルコキシ基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か

10 である）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

15 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、

ハロゲン原子

$-COR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

20 $-CO_2R^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アルキル基；

(iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
25 いてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；

(iv)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい

てもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；

(v) アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
10 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

15 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

20 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

25 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

ラルキル基；

(vi) ヘテロアリール部分を有するヘテロラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
15 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

20 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

25 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および
ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；

(vii) アリール基であって、該アリール基が

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
15 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

20 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

25 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および
ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基; ならびに

(viii)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$

5 アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$

アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および

10 R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)

15 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

20 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N 、 N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で

25 置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

からなる群より選択される基であり、

5 R^{17} は、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_8$ アルキル基であり、

式(V)および式(VI)において、

R^{18} は、

(i)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{10}$ のアルキル基であって、該アルキル基が、

10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

シアノ基、

15 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、

ハロゲン原子

$-COR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

25 $-CO_2R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アルキル基；

(ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_3 \sim C_9$ のアリル基または置換アリル基；

5 (iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；

(iv)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；

(v)アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が
10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ（ $C_1 \sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
15 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か
20 である）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で

5 置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基;

(vi)ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘテロ

10 アリール部分が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

25 -NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、

- ニトロ基、
カルバモイル基、
N- ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、
N, N-ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、
5 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および
ハロゲン原子
からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；ならびに
10 (vii)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_9 \sim C_{30}$ のプロパルギル基または置換プロパルギル基；
からなる群より選択される基であり、
式 (V) において、
Wは、脱離能を有する官能基であり、
15 そして式 (VI) において
*は、新たに生成する不斉中心を示す。
1つの実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^7 および R^8 は、それぞれ独立して、
(i)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい
20 てもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基；
(ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい
てもよい、 $C_2 \sim C_{12}$ のアルケニル基；
(iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
いてもよい、 $C_2 \sim C_{12}$ のアルキニル基；
25 (iv)アリール基であって、該アリール基が
分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$

アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
10 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、
15

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；

25 (v)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$

アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）
10 で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、
15

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

25 (vi) $-(CH_2)_nOCONR^{10}R^{11}$ （ここで、 R^{10} および R^{11} はそれぞれ独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

5 (3)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 C_2 ～ C_6 のアルケニル基；

(4)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 C_2 ～ C_6 のアルキニル基；

(5)アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が

10 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基、

15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、 N,N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

25 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原

5 子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア
ラルキル基;

(6)ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘ

10 テロアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
~C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁
~C₅アルコキシ基、

15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
いてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰
およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、N, N-ジ (C₁~C₄ア
20 ルキル) カルバモイル基、または-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐してい
てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基であ
る) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、

25 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル
基かである)、

- ニトロ基、
カルバモイル基、
N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
5 -NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および
ハロゲン原子
からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；
- 10 (7) アリール基であって、該アリール基が
分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、
分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、
- 15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基；N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、
- 20 シアノ基、
-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、
25 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、

- ニトロ基、
カルバモイル基、
N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
5 -NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および
ハロゲン原子
からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに
- 10 (8)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が
分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、
分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、
- 15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、
シアノ基、
-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、
25 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、

- ニトロ基、
カルバモイル基、
N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
5 -NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および
 ハロゲン原子
 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
10 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;
 (vii) - (CH₂)_nCONR¹²R¹³ (ここで、R¹²およびR¹³はそれぞれ独立して、
 (1)水素原子、
15 (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、
 (3)アリール基であって、該アリール基が
 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、
20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、
 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
25 基、N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基 ; N, N-ジ (C₁~C₄ア

ルキル) カルバモイル基、または -NHCOR^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 5 $\text{-NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 10 $\text{N- (C}_1\sim\text{C}_4\text{アルキル) カルバモイル基、}$
 $\text{N, N-ジ (C}_1\sim\text{C}_4\text{アルキル) カルバモイル基、}$
 -NHCOR^9 (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基である)、および
 ハロゲン原子

- 15 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基、

- 20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基、シアノ基、 $\text{-NR}^{30}\text{R}^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1\sim\text{C}_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $\text{N- (C}_1\sim\text{C}_4\text{アルキル) カルバモイル基； N, N-ジ (C}_1\sim\text{C}_4\text{ア}$

ルキル) カルバモイル基、または $\text{—NHCO}R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

- 5 $\text{—NR}^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 10 $\text{N—}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$\text{N, N—ジ}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$\text{—NHCO}R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

- 15 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

- (viii) $\text{—(CH}_2)_n\text{NR}^{12}\text{COR}^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

- 25 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基； N,N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

N,N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である）、およびハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_5 アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(ix) $-(CH_2)_nNR^{12}R^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立

して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

5 (3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基； N ， N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基、

25 N ， N -ジ（ $C_1\sim C_4$ アルキル）カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

5 (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基; N , N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

25 N , N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

- 5 からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(x) - $(CH_2)_n Y - OR^{12}$ (ここで、 Y は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ の二価の飽和炭化水素基であり、 R^{12} は、

- 10 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

- 15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30}

- 20 および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N , N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、
- 25

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

5 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCO R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

10 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

20 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、または $-NHCO R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

25

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

5 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ ($C_1 \sim C_4$ アルキル) カルバモイル基、

$-NHCO R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

10 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

15 (xi) $-(CH_2)_n-OR^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

20 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

25 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換

されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換

されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基; N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

10 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

15 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

20 からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

(xii) $-(CH_2)_n-S-R^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

25 (3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1

～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
いてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰
およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル
基、N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁～C₄ア
ルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐してい
10 てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基であ
る）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、
水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル
15 基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原
子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア
リール基、ならびに

25 (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁

～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

5 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基；N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

15 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N-（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

N，N-ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、

20 $-NHCOR^9$ （ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

25 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である）；

(xiii) —(CH₂)_n—SO—R¹² (ここで、R¹²は、

(1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

5 (3) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、—NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基; N, N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、または—NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

—NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、
20 水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

25 N, N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

—NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

5 (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

10 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基; N , N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

25 N , N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

- 5 からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ; ならびに

(xiv) $-(CH_2)_n-SO_2-R^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1
10 $\sim C_4$ アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1
 $\sim C_4$ アルキル基、

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1
 $\sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されて
いてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30}
および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換
されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル
20 基、 $N-(C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基; N,N -ジ $(C_1 \sim C_4$ アル
キル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐してい
てもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基であ
る)で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

25 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、
水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル

基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

5 N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

10 リール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₅アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、シアノ基、-NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、ニトロ基、カルバモイル基、

20 N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基; N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、または-NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

25 -NR³⁰R³¹ (ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル

基である)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

5

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、

-NHCO R⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ

10

テロアリール基、

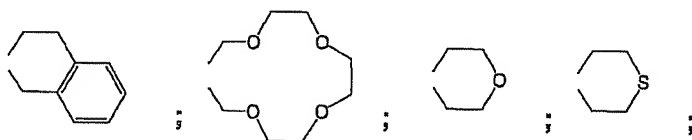
からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

からなる群より選択される基であるか、あるいは、

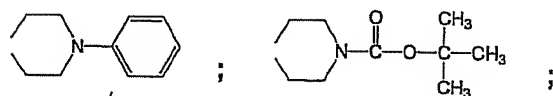
R⁷およびR⁸は一緒になって、-(CH₂)_m- (ここで、mは2から8の

15

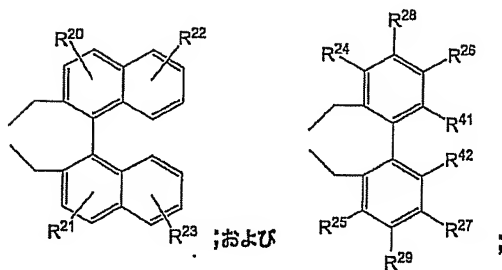
整数である) ;



20



25



(ここで、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{41} 、および R^{42} はそれぞれ独立して、

水素原子；

5 分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル基；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル基；

10 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ のアルキル基で置換されていてもよいアリール基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール基；

20 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコシキ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

25 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞ

れ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである) か、あるいは C_2 ～ C_8 アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール部分を有する、アラルキル基;

- 5 ハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_3 アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである) か、あるいは C_2 ～ C_8 アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール部分を有する、ヘテロアラルキル基;
- 10

(C_1 ～ C_3 アルコキシ) カルボニル基;

カルバモイル基;

N- (C_1 ～ C_4 アルキル) カルバモイル基; ならびに

- 15 N, N-ジ (C_1 ～ C_4 アルキル) カルバモイル基 (ここで、 C_1 ～ C_4 アルキル基は、互いに同じでも異なってもよい) からなる群より選択される基である)

からなる群より選択される二価の基である。

- さらなる実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべては、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基である。
- 20

さらに他の実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべてはメトキシ基、エトキシ基、またはベンジルオキシ基である。

- 25 さらなる実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

水素原子；ならびに

アリール基であつて、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

5 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、ニトロ基、カルバモイル基、
10 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

15 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）、

ニトロ基、

20 カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である）、および

25 ハロゲン原子

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ア

リール基；

からなる群より選択される基である。

さらに他の実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$ は 3, 4, 5-トリフルオロフェニル基または 3, 5-ビストリフルオロ
5 メチルフェニル基である。

さらなる実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基である。

さらに他の実施態様では、上記式 (I) で表される化合物の R^7 および R^8
10 はともに n -ブチル基である。

1つの実施態様では、上記無機塩基は無機塩基水溶液の形態で用いられる。

さらなる実施態様では、上記式 (I V) で表される化合物 1 当量に対し、上記無機塩基水溶液中の上記無機塩基は 0.5 当量以上かつ 280 当量以下の割合で使用される。

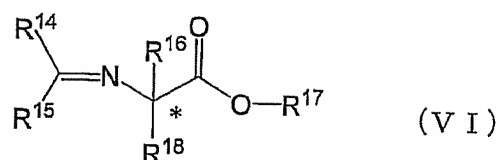
さらに他の実施態様では、上記無機塩基水溶液の濃度は 10 w/w% から
15 70 w/w% である。

さらに他の実施態様では、上記式 (I V) で表される化合物 1 モルに対し、上記式 (I) で表される化合物は、0.0001 モル% から 10 モル% の割合で使用される。

さらに他の実施態様では、上記媒体と上記無機塩基水溶液との容積比は、
20 7 : 1 から 1 : 5 である。

本発明はまた、光学活性な α -アミノ酸を製造するための方法を提供し、該方法は、

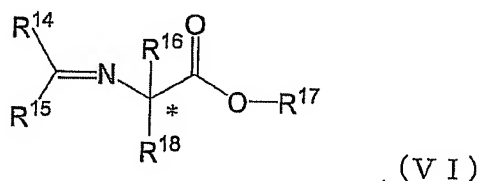
上記いずれかに記載の方法により得られた式 (V I) で表される化合物：



- 5 (ここで、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は上記に定義した基と同様である) のイミノ基 ($\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{C}=\text{N}-$) を酸性条件下で加水分解する工程；および該酸性加水分解産物のエステル基 ($-\text{CO}_2\text{R}^{17}$) を酸性もしくは塩基性条件下で加水分解する工程；を包含する。

本発明はまた、光学活性な α -アミノ酸を製造するための方法を提供し、
10 該方法は、

上記いずれかに記載の方法により得られた式 (VI) で表される化合物：



15

- (ここで、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、 R^{17} および R^{18} は上記に定義した基と同様である) のエステル基 ($-\text{CO}_2\text{R}^{17}$) を塩基性条件下で加水分解する工程；および該塩基性加水分解産物のイミノ基 ($\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{C}=\text{N}-$) を酸性条件下で加水分解する工程；を包含する。

20

本発明によれば、より単純化された構造のキラル相間移動触媒が提供される。この相間移動触媒は、従来の化合物よりもより少ない工程により製造することができる。このように、より容易に提供され得る本発明の相間移動触媒は、例えば、 α -アルキル- α -アミノ酸誘導体および α 、 α -ジアルキル- α -アミノ酸の合成に利用され得る。

25

発明を実施するための最良の形態

以下、本明細書中で用いられる用語を定義する。

用語「分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_n$ のアルキル基」(ここで n は整数)は、炭素数 $1 \sim n$ の任意の直鎖アルキル基、炭素数 $3 \sim n$ の任意の分岐鎖アルキル基、および炭素数 $3 \sim n$ の任意の環状アルキル基を包含する。例えば、炭素数 $1 \sim 6$ の任意の直鎖アルキル基としては、メチル、エチル、 n -プロピル、 n -ブチル、 n -ペンチル、および n -ヘキシルが挙げられ、炭素数 $3 \sim 6$ の任意の分岐鎖アルキル基としては、イソプロピル、イソブチル、*tert*-ブチル、イソペンチルなどが挙げられ、そして炭素数 $3 \sim 6$ の任意の環状アルキル基としては、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。さらに、例えば、用語「分岐または環を形成していてもよく、および/またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{12}$ のアルキル基」という場合は、炭素数 $1 \sim 12$ の直鎖アルキル基、炭素数 $3 \sim 12$ の任意の分岐鎖アルキル基、および炭素数 $3 \sim 12$ の任意の環状アルキル基を包含し、これらの任意の位置の水素原子がハロゲン原子で置換されていてもよい。このようなアルキル基としては、 n -ヘプチル、イソヘプチル、 n -オクチル、イソオクチル、 n -デシル、 n -ドデシルなどが挙げられる。

なお、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基および N, N -ジ($C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイルにおいて、「 $C_1 \sim C_4 \text{アルキル}$ 」は、 $C_1 \sim C_4$ の直鎖アルキル基または $C_3 \sim C_4$ の分岐鎖アルキル基を意味する。

用語「分岐または環を形成していてもよい、 $C_2 \sim C_n$ のアルケニル基」(ここで n は整数)は、炭素数 $2 \sim n$ の任意の直鎖アルケニル基、炭素数 $3 \sim n$ の任意の分岐鎖アルケニル基、および炭素数 $3 \sim n$ の任意の環状アルケニル基を包含する。例えば、炭素数 $2 \sim 6$ の任意の直鎖アルケニル基としては、エテニル、 1 -プロペニル、 2 -プロペニル、 1 -ブテニル、 2 -ブテ

- ニル、1-ペンテニル、2-ペンテニル、3-ペンテニル、4-ペンテニル、1-ヘキセニルなどが挙げられ、炭素数3~6の任意の分岐鎖アルケニル基としては、イソプロペニル、1-メチル-1-プロペニル、1-メチル-2-プロペニル、2-メチル-1-プロペニル、2-メチル-2-プロペニル、
- 5 1-メチル-2-ブテニル、などが挙げられ、そして炭素数3~6の任意の環状アルケニル基としては、シクロブテニル、シクロペンテニル、シクロヘキセニルなどが挙げられる。さらに、例えば、用語「分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 C_2 ~ C_{12} のアルケニル基」という場合は、炭素数2~12の直鎖アルケニル基、
- 10 炭素数3~12の任意の分岐鎖アルケニル基、および炭素数3~12の任意の環状アルケニル基を包含し、これらの任意の位置の水素原子がハロゲン原子で置換されていてもよい。このようなアルケニル基としては、1-ヘプテニル、2-ヘプテニル、1-オクテニル、1-デセニル、1-ドデセニルなどが挙げられる。
- 15 用語「分岐または環を形成していてもよい、 C_2 ~ C_n のアルキニル基」(ここでnは整数)は、炭素数2~nの任意の直鎖アルキニル基、炭素数3~nの任意の分岐鎖アルキニル基、および炭素数3~nの任意の環状アルキニル基を包含する。例えば、炭素数2~6の任意の直鎖アルキニル基としては、エチニル、1-プロピニル、2-プロピニル、1-ブチニル、2-ブチ
- 20 ニル、1-ペンチニル、1-ヘキシニルなどが挙げられ、炭素数3~6の任意の分岐鎖アルキニル基としては、1-メチル-2-プロピニルなどが挙げられ、そして炭素数3~6の任意の環状アルキニル基としては、シクロプロピルエチニル、シクロブチルエチニルなどが挙げられる。さらに、例えば、用語「分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で
- 25 置換されていてもよい、 C_2 ~ C_{12} のアルキニル基」という場合は、炭素数2~12の直鎖アルキニル基、炭素数4~12の任意の分岐鎖アルキニル基、

および炭素数 5 ～ 12 の任意の環状アルキニル基を包含し、これらの任意の位置の水素原子がハロゲン原子で置換されていてもよい。このようなアルキニル基としては、1-ヘプチニル、1-オクチニル、1-デシニル、1-ドデシニルなどが挙げられる。

- 5 用語「分岐していてもよい $C_1 \sim C_n$ のアルコキシ基」（ここで n は整数）は、炭素数 1 ～ n の任意の直鎖アルキル基を有するアルコキシ基および炭素数 3 ～ n の任意の分岐鎖アルキル基を有するアルコキシ基を包含する。例えば、メチルオキシ、エチルオキシ、 n -プロピルオキシ、イソプロピルオキシ、*tert*-ブチルオキシなどが挙げられる。

- 10 本発明において、用語「アラルキル基」の例としては、ベンジル、フェネチル、およびナフチルメチルが挙げられる。

本発明における用語「ヘテロアラルキル基」の例としては、ピリジルメチル、インドリルメチル、フリルメチル、チエニルメチル、およびピロリルメチルが挙げられる。

- 15 本発明において、用語「アリール基」の例としては、フェニル、ナフチル、アントラセニル、フェナントリルなどが挙げられる。

本発明における用語「ヘテロアリール基」の例としては、ピリジル、ピロリル、イミダゾリル、フリル、インドリル、ベンゾチオフェン-2-イル、チエニル、オキサゾリル、チアゾリル、3, 4-メチレンジオキシフェニル、3, 4-エチレンジオキシフェニル、およびテトラゾリルが挙げられる。

- 20 本発明において、用語「ハロゲン原子」の例としては、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子およびフッ素原子が挙げられる。なお、本発明において、用語「ハロゲン化物アニオン」とは、ハロゲンイオンのことを意味し、塩化物イオン、臭化物イオン、ヨウ化物イオン、およびフッ化物イオンが挙げられる。
- 25

本発明において、用語「分岐または環を形成していてもよい、 $C_3 \sim C_n$ の

アリル基または置換アリル基」(ここで n は整数)は、アリル基、あるいは1および/または2および/または3位に置換基を有する任意の合計炭素数4 $\sim n$ の置換アリル基を意味する。例えば、2-ブテニル、1-シクロペンテニルメチル、3-メチル-2-ブテニルなどが挙げられる。

- 5 本発明において、用語「分岐していてもよい、 $C_3 \sim C_n$ のプロパルギル基または置換プロパルギル基」(ここで n は整数)は、プロパルギル基、あるいは1および/または3位に置換基を有する任意の合計炭素数4 $\sim n$ の置換プロパルギル基を意味する。例えば、2-ブチニル、3-トリメチルシリル-2-プロピニルなどが挙げられる。

- 10 本発明において、用語「脱離能を有する官能基」は、置換反応または脱離反応などにおいて、反応基質から離れていく原子または原子団、すなわち脱離基を意味する。例えば、ハロゲン原子、スルホニルオキシ基などが挙げられる。

- 15 なお、本明細書中に用いられる用語「群(Q)」は、本明細書において記載を簡略化させるために便利上使用する用語であって、

「分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

- 20 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N 、 N -ジ($C_1 \sim C_4$ アルキル)カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)
- 25

で置換されていてもよい、アリール基、

シアノ基、

—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、

ニトロ基、

カルバモイル基、

N—(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

N, N—ジ(C₁～C₄アルキル)カルバモイル基、

—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

ハロゲン原子

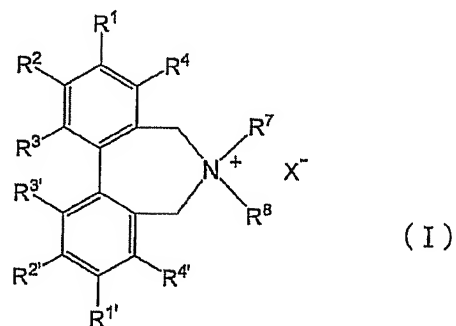
からなる群」を表す用語である。

以下、本発明について詳述する。

<4級アンモニウム塩>

本発明の4級アンモニウム塩は、軸不斉に関して純粋であり、以下の式

(I) :



(ここで、

R¹、R^{1'}、R²、およびR^{2'}は、それぞれ独立して、水素原子であるか；

ハロゲン原子であるか；

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基であるか；あるいは

- 5 ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子であるか；

- 10 ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルキル基であるか；あるいは

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および／または分岐または環を形成していてもよい、 $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基；であり、

15

R^4 および $R^{4'}$ は、それぞれ独立して、

(i)水素原子；

(ii) $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）；

20

(iii)シアノ基；

(iv)ニトロ基；

(v)カルバモイル基；

(vi) $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；

25

(vii) $N, N\text{-ジ}(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基；

(viii) $-NHCOR^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原

子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) ;

(ix)ハロゲン原子 ;

(x)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_6$ のアルキル基 ;

5 (xi)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基 ;

(xii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基 ;

10 (xiii)アラルキル基であって、ここで、該アラルキル基を構成するアリール部分が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

15 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、 N,N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCO R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)で置換されていてもよい、アリール基、

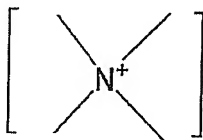
シアノ基、

25 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) 、

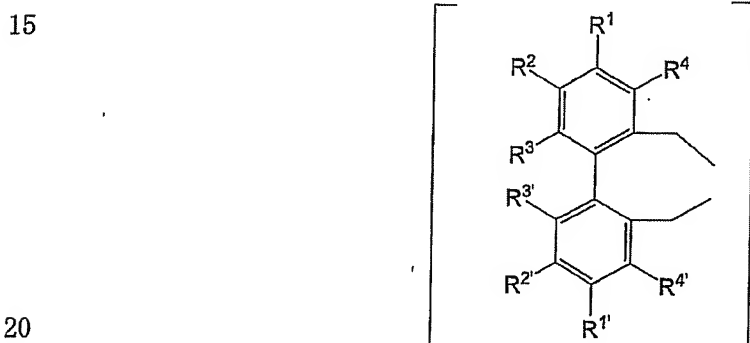
- ニトロ基、
カルバモイル基、
N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基、
5 -NHCOR⁹ (ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である)、および
ハロゲン原子
からなる群 (Q) より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基；
- 10 (xiv) ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、ここで、該ヘテロアリール部分が、上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；
(xv) アリール基であって、ここで、該アリール基が、上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、あるいは3, 4位が一緒になって-O- (CH₂)_p-O- (ここで、pは1または
15 2である) で置換されていてもよい、アリール基；
(xvi) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；ならびに
- 20 (xvii) -S (O)_n-R (ここで、nは0、1、または2であり、そしてRは分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基である) ；
からなる群より選択される基であり、
R⁷およびR⁸はそれぞれ独立して、一価の有機基であるか、あるいは一緒にな
25 って二価の有機基を表し、
X⁻は、ハロゲン化物アニオン、SCN⁻、HSO₄⁻、HF₂⁻、CF₃SO₃⁻、

$\text{CH}_3\text{-Ph-SO}_3^-$ 、または CH_3SO_3^- である)で表される化合物である。上記式(I)で表される化合物は、(S)または(R)のいずれの立体配置を有していてもよい。

上記式(I)で表される化合物は、例えば、後述する光学活性な α -アミノ酸またはその誘導体、特に、 α 、 α -ジアルキル- α -アミノ酸またはその誘導体を製造するための相間移動触媒として有用に機能する。より具体的には、式(IV)で表される化合物を式(V)で表される化合物でアルキル化して式(VI)で表される光学活性な α -アミノ酸またはその誘導体を製造するために、上記式(I)で表される化合物を相間移動触媒として用いる場合、当該化合物のカチオンを構成するアンモニウム部分：



が、該アルキル化における反応性に寄与し、かつビフェニル部分：



が、該アルキル化反応の立体選択性に寄与する。したがって、式(I)で表される化合物における R^7 および R^8 は、1つの実施態様においては、上記カチオンのアンモニウム部分とビフェニル部分とに由来する触媒活性および選択性を保持し得る(あるいは、これら触媒活性および選択性をともに阻害しない)基である。例えば、上記アンモニウム部分およびビフェニル部分と比較して不活性な一価の有機基または二価の有機基であり得る。言い換えれば、

R⁷およびR⁸は、それら自体（またはそれ自体）が反応性に富む基である必要はなく、後述するアミノ酸またはその誘導体の製造における反応に悪影響を及ぼさない基であればよい。あるいは、上記式（I）で表される化合物を、
5 後述する光学活性な α -アミノ酸またはその誘導体の誘導体を製造するための相間移動触媒として使用する場合、上記式（I）において、R⁷およびR⁸は、それぞれ独立して

(i)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₁～C₃₀のアルキル基；

10 (ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂～C₁₂のアルケニル基；

(iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂～C₁₂のアルキニル基；

(iv)アリール基であって、該アリール基が上記群（Q）からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；

15 (v)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群（Q）からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

(vi)－(CH₂)_nOCONR¹⁰R¹¹（ここで、R¹⁰およびR¹¹はそれぞれ独立して、

20 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

(3)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂～C₆のアルケニル基；

25 (4)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂～C₆のアルキニル基；

(5) アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されているいてもよい、アラルキル基；

5 (6) ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が、上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されているいてもよい、ヘテロアラルキル基；

(7) アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されているいてもよい、アリール基、ならびに

10 (8) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が、上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されているいてもよい、ヘテロアリール基、
からなる群より選択される基であり、そして n は 1 から 12 の整数である) ；

15 (vii) $-(CH_2)_n CONR^{12}R^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

(1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されているいてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

20 (3) アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されているいてもよい、アリール基、ならびに

(4) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されているいてもよい、ヘテロアリール基、
25 からなる群より選択される基であり、そして n は 1 から 12 の整数であ

る) ;

(viii) - $(\text{CH}_2)_n \text{NR}^{12} \text{COR}^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

(1) 水素原子、

5 (2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、

(3) アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

10 (4) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数である) ;

15 (ix) - $(\text{CH}_2)_n \text{NR}^{12} \text{R}^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

(1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $\text{C}_1 \sim \text{C}_4$ アルキル基、

20 (3) アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ
25 テロアリール基、
からなる群より選択される基であり、そして n は1から12の整数であ

る) ;

(x) - (CH₂)_nY-OR¹² (ここで、Yは分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄の二価の飽和炭化水素基であり、R¹²は、

5 (1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、な
10 らびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;
15

(xi) - (CH₂)_n-OR¹² (ここで、R¹²は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁~C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、な
20 らびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
25

からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数であ

る) ;

(xii) — (CH₂)_n — S — R¹² (ここで、R¹²は、

(1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C₁

5 ~ C₄ アルキル基、

(3) アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
10 からなる群より選択される基であり、そして n は 1 から 12 の整数である) ;

(xiii) — (CH₂)_n — SO — R¹² (ここで、R¹²は、

15 (1) 水素原子、

(2) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C₁ ~ C₄ アルキル基、

(3) アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに
20

(4) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
からなる群より選択される基であり、そして n は 1 から 12 の整数である) ; ならびに
25

(xiv) — (CH₂)_n — SO₂ — R¹² (ここで、R¹²は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

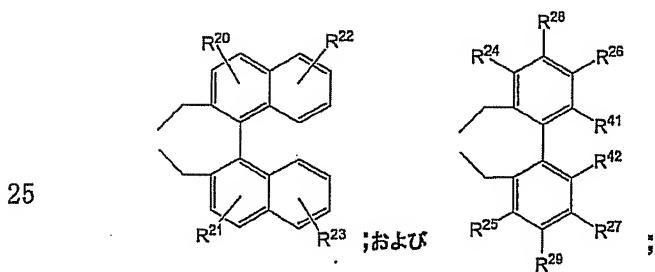
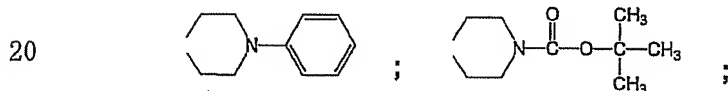
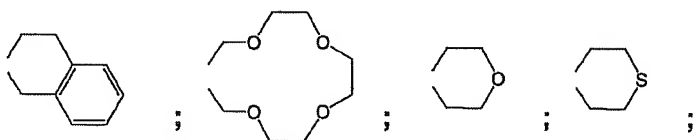
(3)アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、な
5 らびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘ
テロアリール基、

10 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

からなる群より選択される一価の基または一価の有機基であるか、あるいは、

15 R^7 および R^8 は一緒になって、 $-(CH_2)_m-$ (ここで、mは2から8の整数である) ;



(ここで、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{41} 、および R^{42} はそれぞれ独立して、

水素原子；

5 分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル基；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル基；

10 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_8$ アルコキシ基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ のアルキル基で置換されていてもよいアリール基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール基；

20 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_8$ アルコシキ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである）か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

25 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_8$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞ

れ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである) か、あるいは C_2 ～ C_8 アルキレン基で環を構成してなる有する環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール部分を有する、アラルキル基；

- 5 ハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_3 アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基かである) か、あるいは C_2 ～ C_8 アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール部分を有する、ヘテロアラルキル基；
- 10

(C_1 ～ C_3 アルコキシ) カルボニル基；

カルバモイル基；

N- (C_1 ～ C_4 アルキル) カルバモイル基；ならびに

- 15 N, N-ジ (C_1 ～ C_4 アルキル) カルバモイル基 (ここで、 C_1 ～ C_4 アルキル基は、互いに同じでも異なってもよい) からなる群より選択される基である)

からなる群より選択される (二価の有機) 基である。

- 本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべてが、好ましくは、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_5 アルコキシ基である。後述する出発物質の入手が容易であることを考慮すれば、上記式 (I) で表される化合物の R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、および $R^{3'}$ のすべてがメトキシ基、エトキシ基、またはベンジルオキシ基であることが好ましい。
- 25

あるいは、本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^4 およ

び $R^{4'}$ が、好ましくは、それぞれ独立して、

水素原子；ならびに

アリール基であって、該アリール基が上記群（Q）からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；

5 からなる群より選択される。特に、上記式（I）で表される化合物の R^4 および $R^{4'}$ が3, 4, 5-トリフルオロフェニル基または3, 5-ビストリフルオロメチルフェニル基であることが好ましい。このような置換基を有する式（I）で表される化合物を、光学活性な α -アミノ酸およびその誘導体、好ましくは α , α -ジアルキル- α -アミノ酸またはその誘導体を製造する
10 ための相間移動触媒として使用する場合、当該アミノ酸またはその誘導体を優れた収率かつ光学純度で製造することができるからである。

あるいは、本発明においては、上記式（I）で表される化合物の R^7 および R^8 が、好ましくは、それぞれ独立して、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基で
15 ある。あるいは、本明細書中において、 R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、好ましくは分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{12}$ のアルキル基であるか、あるいは分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_{13} \sim C_{30}$ のアルキル基（より好ましくは分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン
20 原子で置換されていてもよい $C_{13} \sim C_{22}$ のアルキル基）である。あるいは、本明細書中において、 R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、好ましくは分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいアルキル基であり、そしてより好ましくは、当該アルキル基を構成する炭素原子数は、1以上、3以上、13以上、15以上、17以上、または18以上
25 上の下限と、30以下、22以下、21以下、20以下、12以下、8以下、または4以下の上限とから構成される範囲から選択され得る。特に、上記式

(I) では、当該化合物の R^7 および R^8 がともに n -ブチル基であることが好ましい。このような置換基を有する式 (I) で表される化合物を、光学活性な α -アミノ酸およびその誘導体、好ましくは α , α -ジアルキル- α -アミノ酸またはその誘導体を製造するための相間移動触媒として使用する場
 5 合、当該アミノ酸またはその誘導体をより優れた収率かつ光学純度で製造することができるからである。

あるいは、本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^1 と $R^{1'}$ とが同一であることが好ましい。

あるいは、本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^2 と $R^{2'}$ とが同一であることが好ましい。
 10

あるいは、本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^3 と $R^{3'}$ とが同一であることが好ましい。

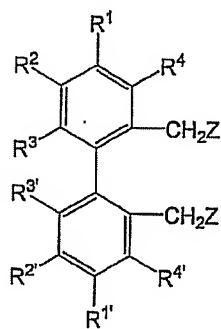
あるいは、本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^4 と $R^{4'}$ とが同一であることが好ましい。

あるいは、本発明においては、上記式 (I) で表される化合物の R^7 と R^8 とが同一であることが好ましい。
 15

< 4級アンモニウム塩の製造方法 >

上記式 (I) で表される 4級アンモニウム塩は、以下の式 (II) :

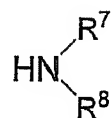
20



25

(II)

で表される化合物を、有機溶媒中、酸捕捉剤の存在下にて、
以下の式 (I I I) :



5

(I I I)

で表される 2 級アミンと反応させることにより製造することができる。

ここで、上記式 (I I) において、

R^1 、 $\text{R}^{1'}$ 、 R^2 、および $\text{R}^{2'}$ は、それぞれ独立して、

10

水素原子であるか；

ハロゲン原子であるか；

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および
／または分岐または環を形成していてもよい、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_5$ アルキル基である
か；あるいは

15

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および
／または分岐または環を形成していてもよい、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_5$ アルコキシ基；であ
り、

R^3 および $\text{R}^{3'}$ は、それぞれ独立して、

ハロゲン原子であるか；

20

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および
／または分岐または環を形成していてもよい、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_5$ アルキル基である
か；あるいは

ハロゲン原子および／またはアリール基で置換されていてもよく、および
／または分岐または環を形成していてもよい、 $\text{C}_1 \sim \text{C}_5$ アルコキシ基；であ
り、

25

R^4 および $\text{R}^{4'}$ は、それぞれ独立して、

- (i) 水素原子；
- (ii) $-NR^{30}R^{31}$ （ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である）；
- 5 (iii) シアノ基；
- (iv) ニトロ基；
- (v) カルバモイル基；
- (vi) $N-(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基；
- (vii) N,N -ジ $(C_1\sim C_4\text{アルキル})$ カルバモイル基；
- 10 (viii) $-NHCO R^9$ （ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1\sim C_4$ アルキル基である）；
- (ix) ハロゲン原子；
- (x) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1\sim C_6$ のアルキル基；
- 15 (xi) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2\sim C_6$ のアルケニル基；
- (xii) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2\sim C_6$ のアルキニル基；
- (xiii) アラルキル基であって、ここで、該アラルキル基を構成するアリー
- 20 ル部分が、上記群（Q）からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基；
- (xiv) ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、ここで、該ヘテロアリール部分が、上記群（Q）からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；
- 25 (xv) アリール基であって、ここで、該アリール基が、上記群（Q）からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、あるい

は3, 4位が一緒になって $-O-(CH_2)_p-O-$ (ここで、 p は1または2である)で置換されていてもよい、アリール基;

(xvi)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基; ならびに

(xvii) $-S(O)_n-R$ (ここで、 n は0、1、または2であり、そして R は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である);

からなる群より選択される基であり、そして

10 Z はハロゲン原子である。

他方、上記式(I I I)において、

R^7 および R^8 はそれぞれ独立して、

(i)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_{30}$ のアルキル基;

15 (ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_{12}$ のアルケニル基;

(iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_{12}$ のアルキニル基;

(iv)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基;

(v)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基;

(vi) $-(CH_2)_nOCONR^{10}R^{11}$ (ここで、 R^{10} および R^{11} はそれぞれ独立して、

(I)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、

(3)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 C_2 ～ C_6 のアルケニル基；

5 (4)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 C_2 ～ C_6 のアルキニル基；

(5)アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基；

10 (6)ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が、上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；

(7)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、な
15 らびに

(8)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

20 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である)；

(vii) $-(CH_2)_n CONR^{12}R^{13}$ (ここで、 R^{12} および R^{13} はそれぞれ独立して、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ～ C_4 アルキル基、
25

(3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群よ

り選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

- (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- 5 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(viii) - (CH₂)_nNR¹²COR¹³ (ここで、R¹²およびR¹³はそれぞれ独立して、

- 10 (1)水素原子、
- (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁ ~ C₄アルキル基、

- (3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに
- 15

- (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;
- 20

(ix) - (CH₂)_nNR¹²R¹³ (ここで、R¹²およびR¹³はそれぞれ独立して、

- (1)水素原子、
- (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁ ~ C₄アルキル基、
- 25

- (3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群よ

り選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

- (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- 5 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(x) $-(CH_2)_nY-OR^{12}$ (ここで、Yは分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ の二価の飽和炭化水素基であり、

10 R^{12} は、

- (1)水素原子、
- (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、
- (3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群より
- 15 選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

- (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- 20 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(xi) $-(CH_2)_n-OR^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

- (1)水素原子、
- (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、
- 25 (3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群よ

り選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

- (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- 5 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

(xii) — (CH₂)_n — S — R¹² (ここで、R¹²は、

- (1)水素原子、
- 10 (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁ ~ C₄アルキル基、

(3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

- 15 (4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群(Q)からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、
- からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

20 (xiii) — (CH₂)_n — SO — R¹² (ここで、R¹²は、

- (1)水素原子、
- (2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁ ~ C₄アルキル基、
- (3)アリール基であって、該アリール基が上記群(Q)からなる群より
- 25 り選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

5 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ; ならびに

(xiv) $-(CH_2)_n-SO_2-R^{12}$ (ここで、 R^{12} は、

(1)水素原子、

(2)分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C_1 ~ C_4 アルキル基、

10 (3)アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基、ならびに

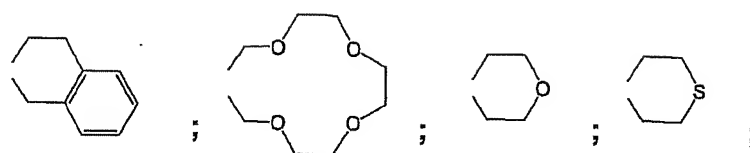
(4)ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基、

15 からなる群より選択される基であり、そしてnは1から12の整数である) ;

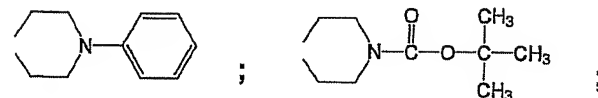
からなる群より選択される基であるか、あるいは、

R^7 および R^8 は一緒になって、 $-(CH_2)_m-$ (ここで、mは2から8の整数である) ;

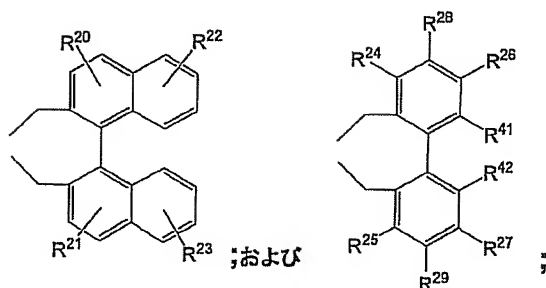
20



5



10



15

(ここで、 R^{20} 、 R^{21} 、 R^{22} 、 R^{23} 、 R^{24} 、 R^{25} 、 R^{26} 、 R^{27} 、 R^{28} 、 R^{29} 、 R^{41} 、および R^{42} はそれぞれ独立して、

水素原子；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_1 \sim C_8$ アルキル基；

20

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルケニル基；

分岐または環を形成していてもよく、および／またはハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_8$ アルキニル基；

25

ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ のアルキル基で置換されていてもよいアリール基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30}

および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール基；

- 5 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

- 10 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、アリール部分を有する、アラルキル基；

- 15 ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基か、ハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_3$ アルコキシ基か、シアノ基か、ハロゲン原子か、ニトロ基か、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである) か、あるいは $C_2 \sim C_8$ アルキレン基で環を構成してなる環状アミノ基か、で置換されていてもよい、ヘテロアリール部分を有する、ヘテロアラルキル基；

- 20 $(C_1 \sim C_3$ アルコキシ) カルボニル基；
- 25 カルバモイル基；

N- (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基 ; ならびに

N, N-ジ (C₁~C₄アルキル) カルバモイル基 (ここで、C₁~C₄アルキル基は、互いに同じでも異なってもよい) からなる群より選択される基である)

- 5 からなる群より選択される (二価の有機) 基である。

本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R¹、R^{1'}、R²、R^{2'}、R³、および R^{3'} のすべてが、好ましくは、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい C₁~C₅アルコキシ基である。入手または合成が容易であることを考慮すれば、上記式 (I I) で表される化合物の R¹、R^{1'}、R²、R^{2'}、R³、および R^{3'} のすべてがメトキシ基、エトキシ基、またはベンジルオキシ基であることが好ましい。

あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R⁴ および R^{4'} が、好ましくは、それぞれ独立して、

水素原子 ; ならびに

- 15 アリール基であって、該アリール基が上記群 (Q) からなる群より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、アリール基 ;

からなる群より選択される。特に、上記式 (I I) で表される化合物の R⁴ および R^{4'} が 3, 4, 5-トリフルオロフェニル基または 3, 5-ビストリフルオロメチルフェニル基であることが好ましい。

- 20 あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R⁷ および R⁸ が、好ましくは、それぞれ独立して、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₁~C₁₂のアルキル基である。特に、上記式 (I I) で表される化合物の R⁷ および R⁸ がともに n-ブチル基であることが好ましい。

- 25 あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R¹ と R^{1'} とが同一であることが好ましい。

あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R^2 と $R^{2'}$ とが同一であることが好ましい。

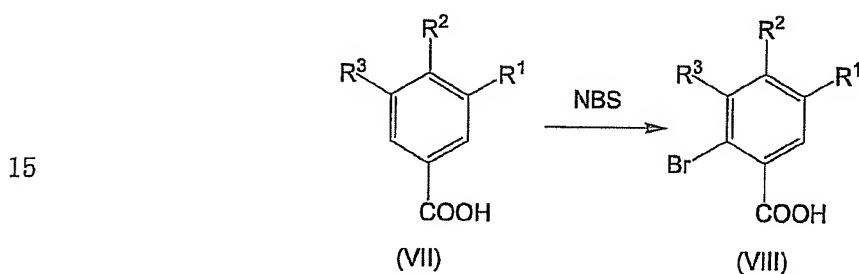
あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R^3 と $R^{3'}$ とが同一であることが好ましい。

5 あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R^4 と $R^{4'}$ とが同一であることが好ましい。

あるいは、本発明においては、上記式 (I I) で表される化合物の R^7 と R^8 とが同一であることが好ましい。

本発明に用いられる式 (I I) の化合物は、例えば、以下のような第一の方法、第二の方法、または第三の方法を用いて合成することができる。

第一の方法としては、まず、以下の式 (V I I) :

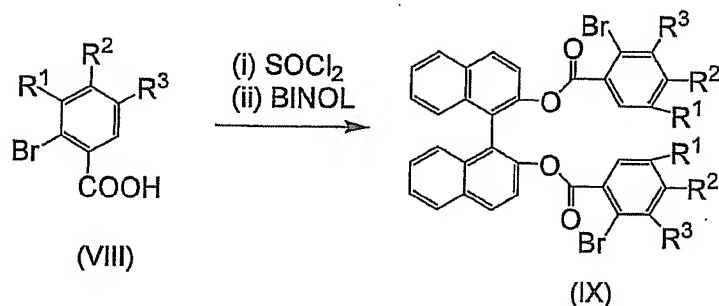


(ここで、 R^1 、 R^2 および R^3 は、それぞれ独立して、上記に定義した基と同様である) で表される化合物を有機溶媒 (例えば、アセトニトリルまたはクロロホルム) に溶解し、この溶液に、例えば、N-ブロモスクシンイミド (NBS) または臭素を添加して、還流下にて加熱する。これにより、2位が臭素化された式 (V I I I) の化合物を得ることができる。なお、式 (V I I) の化合物の具体的な一例としては、3, 4, 5-トリメトキシ安息香酸が挙げられ、これは、例えば、アルドリッチ社より市販されている。

25 次いで、上記で得られた式 (V I I I) の化合物を、例えば (i) SOCl_2 と反応させ酸塩化物に変換した後、THFなどの溶媒中にて (i i)

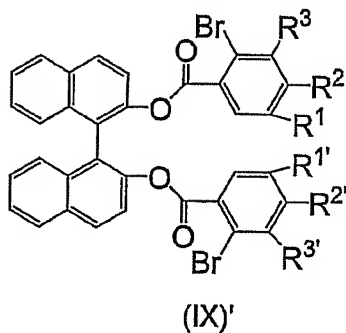
(S) - または (R) - 1, 1' - ビー 2 - ナフトールと反応させることにより、式 (IX) の化合物を得ることができる。なお、この反応において、
 (S) - 1, 1' - ビー 2 - ナフトールまたは (R) - 1, 1' - ビー 2 - ナフトールのいずれかを用いることにより、後述する工程を経て、上記式
 5 (IX) の化合物の絶対配置 (S 体または R 体) を容易に選別することができる。

10



なお、上記においては、1 種類の式 (VIII) で表される化合物を用いた例を説明したが、本発明は特にこれに限定されない。上記式 (VIII) の化合物とともに、式 (VIII) で表されるが互いに異なる化合物（すなわち、R¹の代わりに (R¹とは異なる) R^{1'}を有し、R²の代わりに (R²とは異なる) R^{2'}を有し、および/または R³の代わりに (R³とは異なる) R^{3'}を有する、式 (VIII) で表される化合物) を用いることにより、
 以下の式 (IX)' :

20

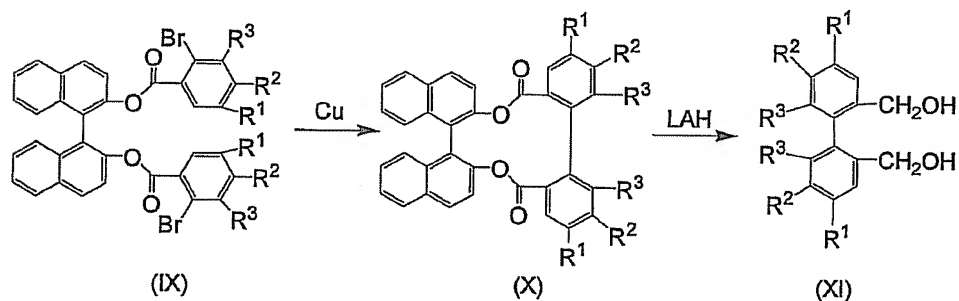


25

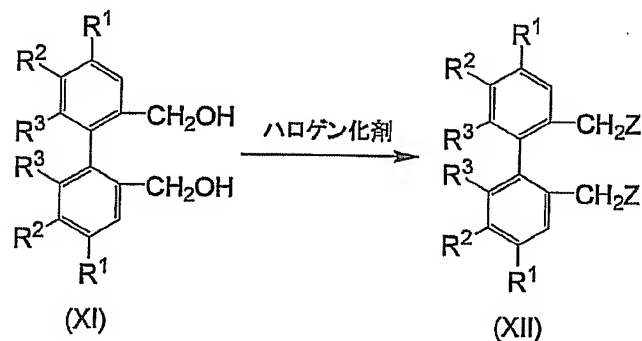
で表される化合物（ここで、R¹、R^{1'}、R²、R^{2'}、R³およびR^{3'}はそれ

ぞれ独立して、上記に定義した基と同様である）も容易に製造することができる。

その後、上記で得られた式 (IX) の化合物は、有機溶媒（例えば、DMF）中に懸濁した活性銅粉末と加熱還流下にて反応させることにより、分子内でカップリングさせた式 (X) で表される化合物に変換することができる。この式 (X) で表される化合物を、水素化アルミニウムリチウムを含有する THF 懸濁液中に添加し、所定時間攪拌することによって、以下の式 (XI) で表されるビフェニルジメタノール化合物を得ることができる：

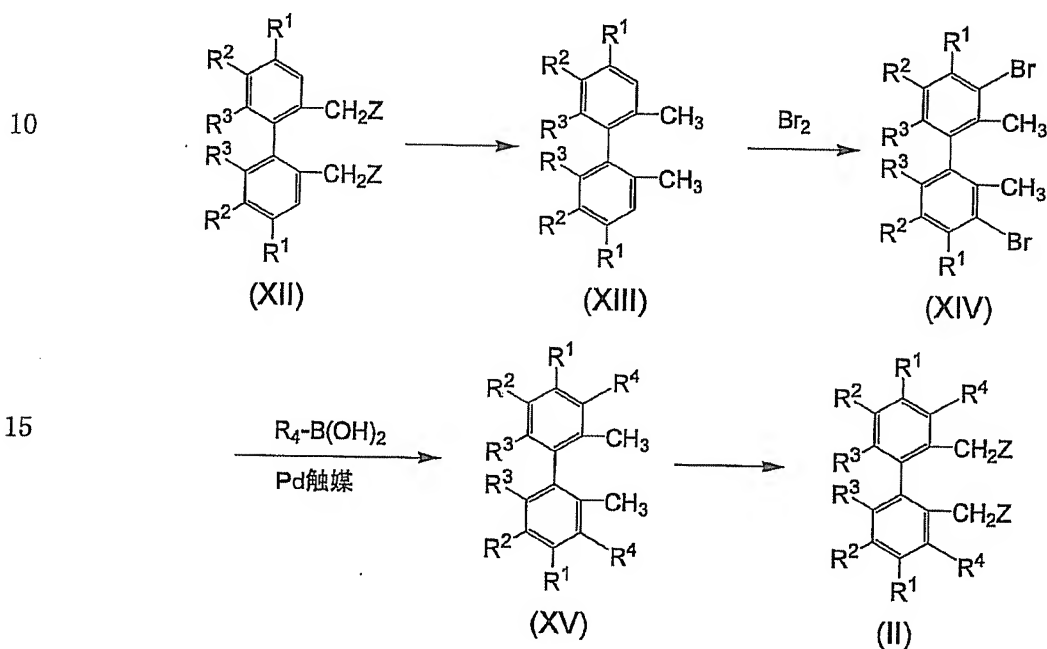


さらに、この式 (XI) で表されるビフェニルジメタノール化合物を、三臭化リン (PBr_3) のようなハロゲン化剤と反応させることにより、式 (XII) で表される化合物（すなわち、上記式 (XI) に包含される化合物であって、 R^4 および $\text{R}^{4'}$ がともに水素原子である化合物）を得ることができる。



（ここで、Zはハロゲン原子である）

本発明において、上記式 (I I) で表される化合物のうち、 R^4 および $R^{4'}$ が水素原子である化合物を得ることが所望される場合は、上記式 (X I I) の化合物をそのまま使用することができる。一方、上記式 (I I) で表される化合物のうち、 R^4 および $R^{4'}$ が水素原子以外の基である化合物を得ようとする場合は、さらに以下の反応スキーム 1 を経て、上記式 (I I) の化合物を製造することができる。なお、簡略化するために、 R^4 および $R^{4'}$ が同一である場合について説明する。



<反応スキーム 1>

上記反応スキーム 1 を参照すれば、得られた式 (X I I) で表される化合物について、当該分野で通常用いられる手段を用いて脱ハロゲン化を行い、式 (X I I I) の化合物とする。次いで、この式 (X I I I) で表される化合物をピリジンなどの有機溶媒に溶解し、これに臭素を添加することによって、3 位および 3' 位が臭素化された式 (X I V) で表される化合物に変換

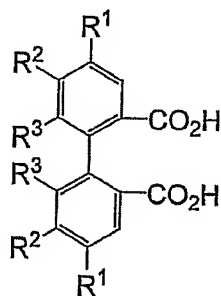
することができる。

その後、式 (XIV) の化合物は、THFなどの有機溶媒中、パラジウム触媒の存在下にて、 $R^4-B(OH)_2$ または $R^{4'}-B(OH)_2$ で表される少なくとも1種のボロン酸誘導体（ここで、 R^4 および $R^{4'}$ はそれぞれ独立して、上記に定義した基と同様である）との Suzuki-Miyaura カップリング反応に供される。当該ボロン酸誘導体のより具体的な例としては、3, 4, 5-トリフルオロフェニルボロン酸が挙げられる。このことにより、3位および3'位の臭素原子が、 R^4 基または $R^{4'}$ 基で置換された式 (XV) の化合物が生成する。

得られた式 (XV) の化合物は、最終的に、当該分野で通常用いられる手段によってハロゲン化され、 R^4 （および／または $R^{4'}$ ）が水素原子以外の基でなる上記式 (II) で表される化合物を製造することができる。

次に、本発明に用いられる式 (II) の化合物を合成するための、第二の方法について説明する。

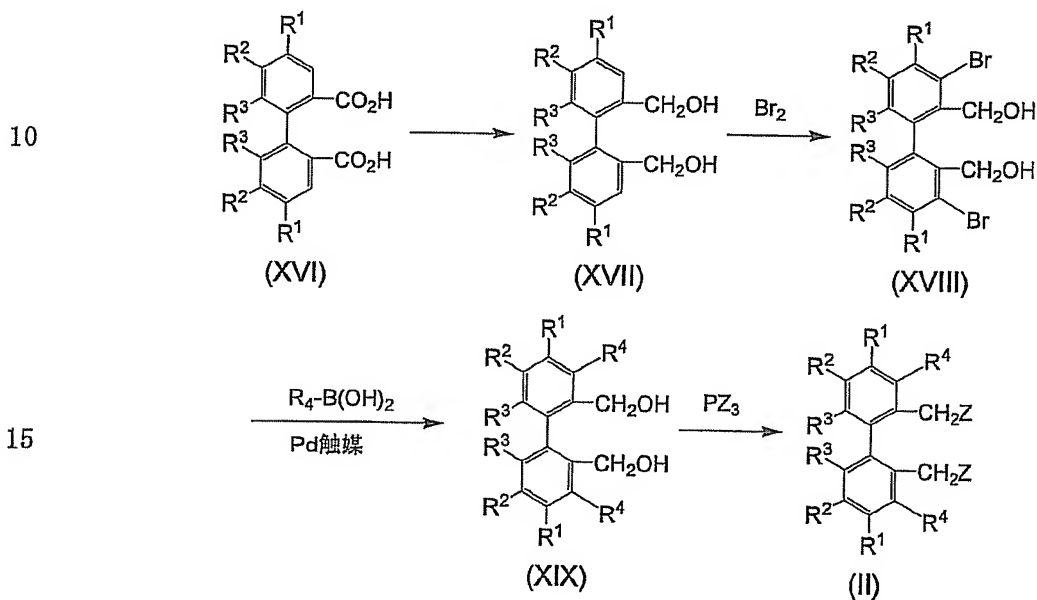
当該第二の方法は、一般に市販されているエラグ酸を出発物質として使用する方法である。すなわち、当該出発物質を用いて、オウ・ティ・シュミット (O. T. Schmidt) らの方法 (O. T. Schmidt, K. Demmler, Justus Liebigs Ann. Chem., 1952, 576, 85) により、以下の式 (XVI) :



(XVI)

（ここで、 R^1 、 R^2 および R^3 は、上記で定義した基と同様である）

で表されるジカルボン酸化合物の光学活性体を得ることができる。あるいは、
 上記式 (X V I) で表される化合物は、例えば、上記式 (X) で表される化
 合物を塩基性水溶液で処理することによっても得られる。これらの方法によ
 れば、上記式 (X V I) で表される化合物の S 体または R 体のいずれであつ
 ても、選択的に製造することができる。その後、以下の反応スキーム 2 を経
 て、上記式 (I I) の化合物が製造される。なお、簡略化するために、 R^4
 および $R^{4'}$ が同一である場合について説明する。



<反応スキーム2>

上記反応スキーム 2 を参照すれば、得られた式 (X V I) の化合物につい
 て、当該化合物のジカルボン酸部分が、THFなどの有機溶媒中、 $\text{BH}_3 \cdot \text{Me}_2\text{S}$ によってジメタノール (式 (X V I I) で表される化合物) に変換
 される。次いで、この式 (X V I I) の化合物を、ピリジンなどの有機溶媒
 中、臭素と反応させることにより、3 位および 3' 位が臭素化された式 (X
 V I I I) の化合物が生成される。

その後、式 (XVII) の化合物は、THFなどの有機溶媒中、パラジウム触媒の存在下にて、 $R^4-B(OH)_2$ または $R^{4'}-B(OH)_2$ で表される少なくとも1種のボロン酸誘導体（ここで、 R^4 および $R^{4'}$ はそれぞれ独立して、上記に定義した基と同様である）と Suzuki-Miyaura

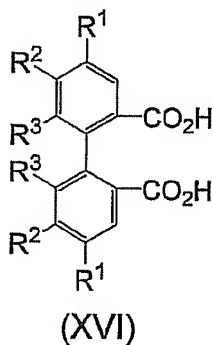
5 r a カップリング反応に供される。当該ボロン酸誘導体のより具体的な例としては、3, 4, 5-トリフルオロフェニルボロン酸が挙げられる。このことにより、3位および3'位の臭素原子が R^4 基または $R^{4'}$ 基で置換された式 (XIX) の化合物が生成される。

得られた式 (XIX) の化合物は、最終的に、三臭化リン (PBr_3) の

10 ようなハロゲン化剤と反応させることにより、 R^4 （および／または $R^{4'}$ ）が水素原子以外の基でなる上記式 (II) で表される化合物に変換することができる。

次に、本発明に用いられる式 (II) の化合物を合成するための、第三の方法について説明する。

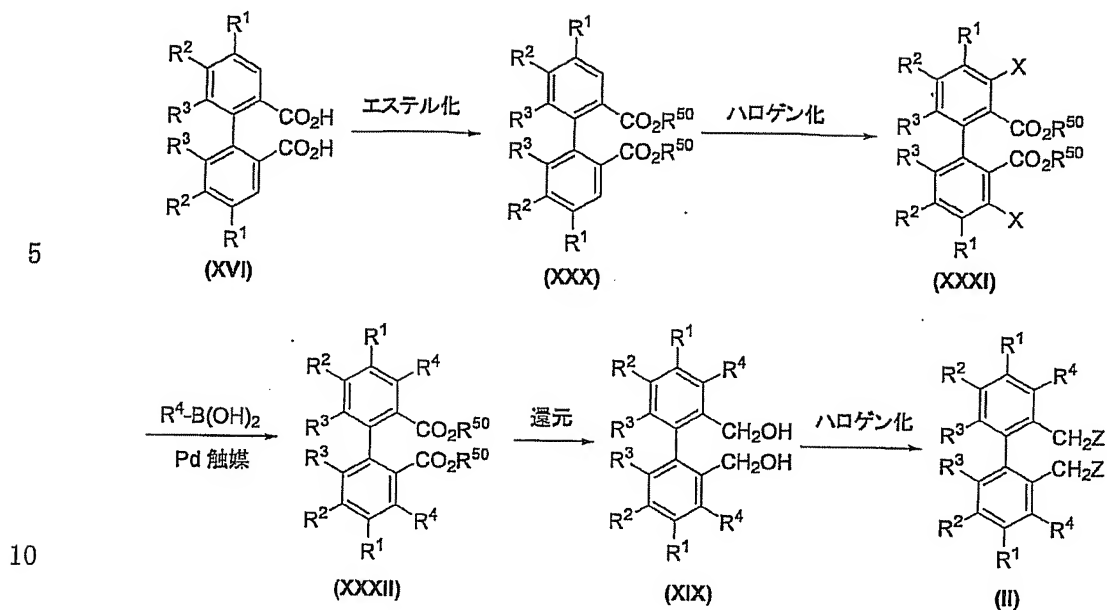
15 当該第三の方法は、上記第二の方法と同様に、以下の式：



（ここで、 R^1 、 R^2 および R^3 は、上記で定義した基と同様である）

で表されるジカルボン酸化合物の光学活性体を出発物質として使用する方法である。以下の反応スキーム3を経て、上記式 (II) の化合物が製造される。なお、簡略化するために、 R^4 および $R^{4'}$ が同一である場合について説明する。

25



<反応スキーム3>

15 上記反応スキーム3を参照すれば、得られた式(XVI)の化合物について、当該化合物のジカルボン酸部分が、アセトンなどの有機溶媒中、無機塩基存在下、ハロゲン化アルキルによってエステル(式(XXX)で表される化合物)に変換される。また、得られた式(XVI)の化合物について、当該化合物のジカルボン酸部分が、塩化チオニルなどで処理することで酸塩化物とした後、ピリジンなどの有機塩基存在下、アルコールで処理することによってエステル(式(XXX)で表される化合物)に変換される。

次いで、この式(XXX)の化合物を、アセトニトリルなどの有機溶媒中、臭素と反応させることにより、3位および3'位が臭素化された式(XXXI)の化合物が生成される。

その後、式(XXXI)の化合物は、DMEなどの有機溶媒中、パラジウム触媒の存在下にて、 $\text{R}^4\text{-B(OH)}_2$ または $\text{R}^{4'}\text{-B(OH)}_2$ で表される少なくとも1種のボロン酸誘導体(ここで、 R^4 および $\text{R}^{4'}$ はそれぞれ

25

独立して、上記に定義した基と同様である)とSuzuki-Miyauraカップリング反応に供される。当該ボロン酸誘導体のより具体的な例としては、3, 4, 5-トリフルオロフェニルボロン酸が挙げられる。このことにより、3位および3'位の臭素原子がR⁴基またはR^{4'}基で置換された式
5 (XXXII)の化合物が生成される。

さらに、得られた式(XXXII)の化合物は、当該化合物のエステル部分シクロペンチルメチルエーテル(CPME)などの有機溶媒中、水素化リチウムアルミニウム(LAH)で還元することでジメタノール(式(XIX)で表される化合物)に変換される。

10 得られた式(XIX)の化合物は、最終的に、三臭化リン(PBr₃)のようなハロゲン化剤と反応させることにより、R⁴(および/またはR^{4'})が水素原子以外の基でなる上記式(II)で表される化合物に変換することができる。

このように、上記第一の方法、第二の方法、または第三の方法を用いて、
15 本発明に用いられる式(II)の化合物を効率良く製造することができる。

一方、本発明の式(I)で表される化合物の製造方法において、上記式(III)の2級アミンは、市販されているものが多く、入手が容易であるため、適宜選択することができる。

本発明の上記式(I)の化合物の製造のための反応工程に用いられる有機
20 溶媒としては、ニトリル系溶媒(例えば、アセトニトリル、プロピオニトリルなど)、エーテル系溶媒(例えば、ジオキサン、テトラヒドロフラン、イソプロピルエーテル、ジエチルエーテル、ジメトキシエタン、2-メトキシエチルエーテルなど)、アルコール系溶媒(例えば、メタノール、エタノール、n-プロパノール、イソプロパノール、n-ブタノール、tert-ブ
25 タノールなど)、エステル系溶媒(例えば、酢酸エチル、酢酸イソプロピル)、アミド系溶媒(例えば、N, N-ジメチルホルムアミド、N, N-ジ

メチルアセトアミド)などが挙げられる。本発明においては、特に、アセトニトリルが好ましい。酸捕捉剤としては、炭酸カリウム、炭酸ナトリウム、炭酸水素カリウム、炭酸水素ナトリウムなどの無機塩基が挙げられる。

上記反応において、式 (I I I) の2級アミンは、式 (I I) の化合物に
5 対して好ましくは0.5当量~10当量、より好ましくは0.8当量~3当
量で用いられる。酸捕捉剤は、式 (I I) の化合物に対して好ましくは0.
5当量~10当量、より好ましくは0.8当量~5当量で用いられる。式
(I I) の化合物と式 (I I I) の2級アミンとの反応は、酸捕捉剤の存在
下、適切な有機溶媒中、攪拌しながら行われる。反応温度は、好ましくは、
10 室温から有機溶媒の沸点までであり、より好ましくは加熱還流下で反応が行
われる。反応時間は、好ましくは15分間~24時間、より好ましくは30
分間~12時間である。このとき、有機溶媒は、式 (I I) の化合物に対し
て容積 (mL) / 重量 (g) 比で、好ましくは5~50倍、より好ましくは
5~30倍の量を用いる。反応終了後、反応混合物を、ジクロロメタン、ジ
15 クロロエタン、クロロホルム、酢酸エチルなどによる抽出、シリカゲルカラ
ムクロマトグラフィーなどによって単離・精製することにより、式 (I) の
化合物を得ることができる。あるいは、反応混合物を、そのまま以下に詳述
する α -アミノ酸誘導体の製造方法に相間移動触媒として使用してもよい。
このようにして得られた X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化
20 合物は、軸不斉に関して純粋な形態であり、相間移動触媒として使用され得
る。ここで、「軸不斉に関して純粋」とは、軸不斉に基づいて考えられる各
種立体異性体のうち、1つの特定の異性体の存在率が、他の異性体より多い
ことをいう。好ましくは、当該異性体の特定な一つの存在率は、90%以上、
より好ましくは95%以上、さらにより好ましくは98%以上である。

25 さらに、上記 X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物は、例
えば、以下の工程を経て、ハロゲン化物アニオンが SCN^- 、 HSO_4^- 、ま

たは HF_2^- 、 CF_3SO_3^- 、 $\text{CH}_3-\text{Ph}-\text{SO}_3^-$ 、または CH_3SO_3^- に変換された化合物とすることができる。

まず、 X^- が SCN^- または HSO_4^- である式 (I) の化合物の製造方法について説明する。

5 上記のようにして得られた X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物は、特開 2002-173492 号公報に記載の方法に準じて、例えば、適切な第二の有機溶媒中に溶解し、チオシアン酸アルカリ金属塩の飽和水溶液と混合することにより、 X^- であるハロゲン化物アニオンが、 SCN^- に変換される。

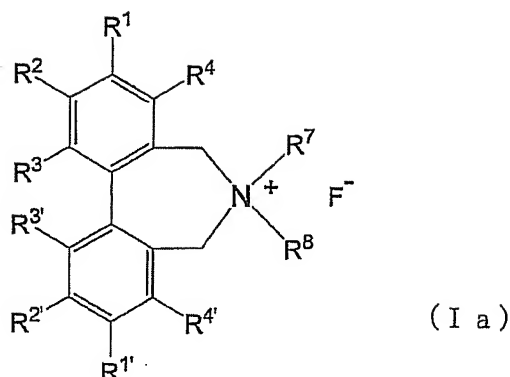
10 この交換において使用可能な第二の有機溶媒の例としては、ジクロロメタン、クロロホルム、ジクロロエタン、テトラヒドロフラン、メチルtertブチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、および酢酸エチルが挙げられる。チオシアン酸アルカリ金属塩の例としては、チオシアン酸カリウムおよびチオシアン酸ナトリウムが挙げられる。

15 X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物と、チオシアン酸アルカリ金属塩との反応は、例えば、室温のような比較的温和な条件下の溶液中で混合接触することにより、容易に進行し、反応生成物（すなわち、 X^- が SCN^- である式 (I) の化合物を定量的収率で得ることができる。

20 また、上記 X^- が SCN^- である式 (I) の化合物は、濃硫酸と反応させることにより、 X^- が SCN^- から、さらに HSO_4^- へと容易に変換される。

25 このようにして得られた X^- が HSO_4^- である式 (I) の化合物は、さらにフッ化アルカリ金属塩（例えば、フッ化カリウム、フッ化ナトリウム、またはフッ化リチウム）と反応させることによって、例えば、シリルエノールエーテルとカルボニル化合物との反応（アルドール反応）における触媒として利用可能な式 (I a) :

5



（ここで、 R^1 、 $R^{1'}$ 、 R^2 、 $R^{2'}$ 、 R^3 、 $R^{3'}$ 、 R^4 、 $R^{4'}$ 、 R^7 および R^8 は、それぞれ独立して、上記式（I）において定義されたものと同様である）で表される化合物を得ることもできる。

上記アルドール反応において使用されるシリルエノールエーテルは、例えば、トリルアルキルシリルエノールエーテルである。トリルアルキルシリルエノールエーテルは、トリメチルシリルクロリド、トリエチルシリルクロリドなどのクロロシランを、塩基の存在下にてカルボニル化合物（例えば、2-ブタノン、4-ペンテン-2-オン、ジエチルケトン、アセトフェノン、プロピオフェノン、ブチロナフトン、シクロキシヘサノン、1-オキシインダン、1-テトラロン、または2-テトラロンのようなケトン誘導体）と反応させることにより予め調製され得る。

上記アルドール反応において使用されるシリルエノールエーテルと反応するカルボニル化合物としては、シリルエノールエーテルの前駆体であるカルボニル化合物（上記ケトン誘導体）に加えて、アセチルアルデヒド、プロピオンアルデヒド、ブチルアルデヒド、イソブチルアルデヒド、イソバレルアルデヒド、カブロンアルデヒド、ドテシルアルデヒド、パルミチンアルデヒド、ステアリンアルデヒド、アクロレイン、クロトンアルデヒド、シクロヘキサンカルブアルデヒド、ベンズアルデヒド、アニスアルデヒド、ニコチンアルデヒド、シンナムアルデヒド、 α -ナフトアルデヒド、 β -ナフトアル

デヒドなどのアルデヒド化合物が挙げられる。

このようなシリルエノールエーテルおよびカルボニル化合物に対し、式 (I a) で表される化合物は、上記アルドール反応の触媒として使用され、当該反応の立体選択性を制御することができる。

- 5 次に、 X^- が HF_2^- 、 $CF_3SO_3^-$ 、 $CH_3-Ph-SO_3^-$ 、または $CH_3SO_3^-$ である式 (I) の化合物の製造方法について説明する。

上記のようにして得られた X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物を、まず、イオン交換樹脂と接触させ、第一の中間体を生成する。

- 10 上記イオン交換樹脂は、当業者によって任意に選択可能である。使用可能なイオン交換樹脂の具体的な例としては、アンバーリスト A 26 (OH) (オルガノ社製) が挙げられる。

- 15 X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物とイオン交換樹脂との接触は、例えば、上記 X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物を適切な第三の溶媒に溶解し、この溶液を当該イオン交換樹脂を充填したカラムに通すことにより行われる。このような接触を行う際に使用され得る第三の溶媒はアルコール溶媒が好ましい。アルコール溶媒の具体的な例としては、メチルアルコール、エチルアルコール、イソプロピルアルコール、およびノルマルプロピルアルコールが挙げられるが、特にこれらに限定されない。

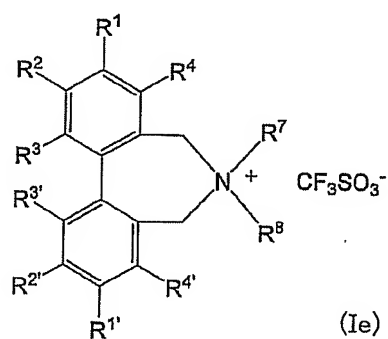
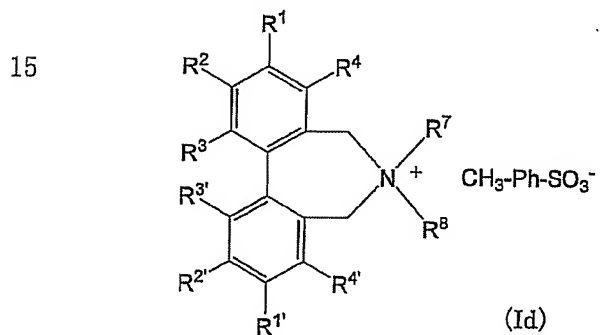
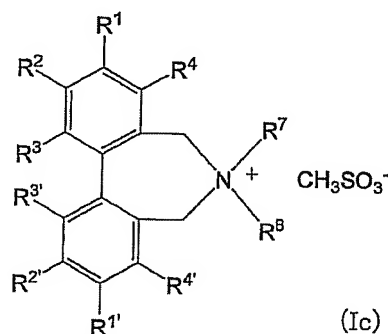
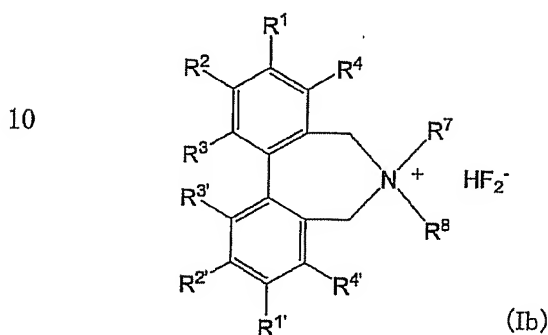
- 20 この接触において使用される上記 X^- がハロゲン化物アニオンである式 (I) の化合物および第三の溶媒の量は、特に限定されず、当業者によって適切に設定され得る。

このようにして、第一の中間体が生成される。

- 25 次いで、得られた第一の中間体は、好ましくは上記溶媒を除去することなく、酸の溶液（例えば、フッ化水素水溶液、メタンスルホン酸溶液、トルエンスルホン酸溶液、トリフルオロメタンスルホン酸溶液）で処理される。

本発明に用いられる酸の溶液の使用量は、特に限定されないが、生産性を高める点から、好ましくは、上記で使用した X^- がハロゲン化物アニオンである式(I)の化合物に対して等量以上のフッ化水素またはスルホン酸が反応するように選択される。これにより、第一の中間体から4級アンモニウム部分

5 部分が遊離し、溶液中に、 X^- がハロゲン化物アニオンから、さらに HF_2^- 、 $CF_3SO_3^-$ 、 $CH_3-Ph-SO_3^-$ 、または $CH_3SO_3^-$ へと変換された式(Ib)～式(Ie)：



20

で表される化合物を沈殿させることができる。

その後、この式(Ib)～式(Ie)の化合物は、当業者が通常用いる手段を用いて溶媒を除去することにより、容易に単離され得る。

このようにして得られた、式(Ib)～式(Ie)の化合物のうち、特に

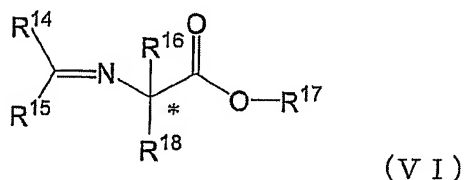
25 式(Ib)の化合物は、例えば、ジアステレオ選択的かつエナンチオ選択的に制御されたニトロアルコールを生成するための触媒としても利用され得る。

< α -アミノ酸誘導体の製造方法 >

次に、式 (I) で表される本発明の 4 級アンモニウム化合物を相間移動触媒として用いて、 α -アミノ酸誘導体を製造する方法について説明する。

式 (VI) で表される α -アミノ酸誘導体：

5



(ここで、

10 R^{14} および R^{15} は、それぞれ独立して、

(i) 水素原子；あるいは

(ii) アリール基であって、該アリール基が

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基、シアノ基、 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、ニトロ基、カルバモイル基、 $N-(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、 N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{ アルキル})$ カルバモイル基、または $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である) で置換されていてもよい、アリール基、

25 シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素

原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

5 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

10 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基;であり、ただし R^{14} および R^{15} がともに水素原子である場合を除き、

R^{16} は、

(i)水素原子;

15 (ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_{10}$ のアルキル基であって、該アルキル基が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

シアノ基、

20 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

25 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、

ハロゲン原子

5 —COR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）、および

—CO₂R⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）

からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アルキル基；

10 (iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂～C₆のアルケニル基；

(iv)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、C₂～C₆のアルキニル基；

(v)アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が

15 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₅アルコキシ基、

20 ハロゲン原子、分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基、シアノ基、—NR³⁰R³¹（ここで、R³⁰およびR³¹は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基かである）、アミノ基、ニトロ基、カルバモイル基、N—（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、N，N—ジ（C₁～C₄アルキル）カルバモイル基、または—NHCOR⁹（ここで、R⁹は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよいC₁～C₄アルキル基である）で置換されていてもよい、アリール基、

25

シアノ基、

$-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

5 ニトロ基、

カルバモイル基、

$N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N,N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

10 $-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

ハロゲン原子

からなる群 (Q) より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アラルキル基；

15 (vi) ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が、上記群 (Q) より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；

(vii) アリール基であって、該アリール基が、上記群 (Q) より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アリール基；ならびに

20 (viii) ヘテロアリール基であって、該ヘテロアリール基が、上記群 (Q) より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、ヘテロアリール基；

からなる群より選択される基であり、

R^{17} は、分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_8$ アルキル基であり、

25 R^{18} は、

(i) 分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されてい

てもよい $C_1 \sim C_{10}$ のアルキル基であって、該アルキル基が、

分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_5$ アルコキシ基、

シアノ基、

- 5 $-NR^{30}R^{31}$ (ここで、 R^{30} および R^{31} は、それぞれ独立して、水素原子か、またはハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基かである)、

ニトロ基、

カルバモイル基、

- 10 $N-(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

N, N -ジ $(C_1 \sim C_4 \text{アルキル})$ カルバモイル基、

$-NHCOR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、

ハロゲン原子

- 15 $-COR^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)、および

$-CO_2R^9$ (ここで、 R^9 は分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい $C_1 \sim C_4$ アルキル基である)

- 20 からなる群より選択される少なくとも1つの基で置換されていてもよい、アルキル基；

(ii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_3 \sim C_9$ のアリル基または置換アリル基；

(iii)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルケニル基；

- 25 (iv)分岐または環を形成していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_2 \sim C_6$ のアルキニル基；

(v) アラルキル基であって、該アラルキル基を構成するアリール部分が、上記群 (Q) より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、アラルキル基；

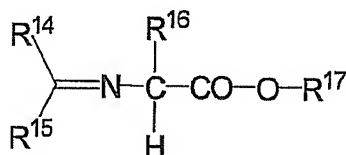
5 (vi) ヘテロアリール部分を有するヘテロアラルキル基であって、該ヘテロアリール部分が、上記群 (Q) より選択される少なくとも 1 つの基で置換されていてもよい、ヘテロアラルキル基；ならびに

(vii) 分岐していてもよくかつハロゲン原子で置換されていてもよい、 $C_3 \sim C_9$ のプロパルギル基または置換プロパルギル基；

からなる群より選択される基であり、そして

10 * は、新たに生成する不斉中心を示す) は、

式 (I V) で表される化合物：



15

(I V)

(ここで、 R^{14} 、 R^{15} 、 R^{16} 、および R^{17} 、上記式 (V I) において定義されたものと同様である)

を、媒体中、無機塩基の存在下、上記式 (I) で表される化合物を相間移動触媒として用いて、式 (V) の化合物：

20



(ここで、 R^{18} は、上記式 (V I) において定義されたものと同様であり、そして W は、脱離能を有する官能基である) でアルキル化する工程によって、立体選択的に製造することができる。

25

上記アルキル化工程で用いられる媒体としては、ベンゼン、トルエン、キシレン、ジエチルエーテル、ジイソプロピルエーテル、テトラヒドロフラン、ジオキサン、メシチレン、酢酸エチル、酢酸イソプロピル、シクロペンチル

メチルエーテル、メチル α -ブチルエーテルなどが挙げられる。あるいは、媒体は、これらのうちの水と混ざらない媒体と水との二相系媒体であってもよい。媒体は、式 (I V) の化合物に対して容積 (mL) / 重量 (g) 比で好ましくは 0.5 倍 ~ 30 倍、より好ましくは 1 倍 ~ 25 倍を使用し得る。

- 5 上記アルキル化工程で用いられる無機塩基としては、水酸化リチウム、水酸化ナトリウム、水酸化カリウム、水酸化カルシウム、水酸化ルビジウム、水酸化セシウムなどが挙げられる。無機塩基は、式 (I V) の化合物に対して好ましくは 0.5 当量 ~ 100 当量、より好ましくは 0.8 当量 ~ 40 当量を使用し得る。

- 10 なお、上記アルキル化工程において、無機塩基は無機塩基水溶液の形態で用いられてもよい。無機塩基水溶液の形態で用いられる場合、無機塩基水溶液中に含有されていてもよい無機塩基の上限は、式 (I V) の化合物に対して、好ましくは 280 当量以下、より好ましくは 150 当量以下、さらにより好ましくは 56 当量以下である。また、無機塩基水溶液中に含有されてい
- 15 てもよい無機塩基の下限は、式 (I V) の化合物に対して、好ましくは 0.5 当量以上、より好ましくは 0.8 当量以上、さらにより好ましくは 0.9 当量以上である。無機塩基水溶液としては、好ましくは 5 w/w% ~ 70 w/w%、より好ましくは 10 w/w% ~ 60 w/w% を使用し得る。

- 20 媒体と無機塩基水溶液との容積比は、媒体容積 (mL) / 無機塩基水溶液容積 (mL) 比で、好ましくは 7/1 ~ 1/5、より好ましくは 5/1 ~ 1/3、さらにより好ましくは 4/1 ~ 1/1 である。

- 25 上記アルキル化工程において、式 (V) の化合物は、式 (I V) の化合物に対して、好ましくは 0.5 当量 ~ 10 当量、より好ましくは 0.7 当量 ~ 6 当量、さらにより好ましくは 0.9 当量 ~ 5 当量用いる。式 (I) の化合物は、式 (I V) の化合物 1 モルに対して、好ましくは 0.0001 モル% 以上、より好ましくは 0.0005 モル% 以上の下限で、かつ好ましくは 1

0モル%以下、より好ましくは2モル%以下、さらにより好ましくは1モル%以下、またさらにより好ましくは0.5モル%以下の上限で相間移動触媒として用いる。このように本発明に用いられる相間移動触媒は、その活性自体が非常に高いため、式(I V)の化合物1モルに対して極めて少量を使用することのみで、所望の光学活性な α -アミノ酸およびその誘導体を得ることができる。

また、本発明においては、式(I)で表される不斉相間移動触媒とテトラブチルアンモニウムブロミド(TBAB)のようなアキラルな4級アンモニウム塩を併用してもよい。例えば、TBABは本発明における反応系において助触媒として機能し、得られる α -アミノ酸およびその誘導体の収率を向上させるとともに、本発明に用いられる式(I)で表される不斉相間移動触媒の使用量をさらに低減させることができる。本発明において使用され得るTBABの量は、上記式(I V)の化合物1モルに対し、好ましくは0.005モル%~1モル%であり、より好ましくは0.01%~0.8モル%である。

上記アルキル化工程はまた、例えば、-70℃から室温までの間の適切な温度、好ましくは-20℃~20℃で、空气中、窒素雰囲気下、またはアルゴン雰囲気下などにて行われる。この工程は、アルキル化反応が十分に進行するまで適切な時間にわたって、攪拌しながら行われ得る。反応時間は、好ましくは30分間~48時間、より好ましくは1時間~24時間である。

なお、上記アルキル化工程を行うにあたり、上記無機塩基水溶液を用いる場合、例えば、以下のように当該工程を複数に分けて行うことができる。

すなわち、まず、上記媒体に、式(I V)の化合物、式(I)の相間移動触媒、および式(V)の化合物をそれぞれ添加して混合物が調製される。この際、氷・塩などの冷却下にて充分な攪拌を行うことが好ましい。その後、この混合物を冷却し、かつ上記無機塩基水溶液を添加することにより、該式

(I V) の化合物がアルキル化される。この混合物の冷却に際して設定される温度は、好ましくは -20°C ～ 20°C であり、より好ましくは -15°C ～ 15°C であり、さらにより好ましくは -10°C ～ 10°C である。

上記のような本発明の式 (I) の化合物を用いる本発明の方法によれば、
5 光学活性な式 (V I) の化合物を、高収率かつ高光学純度で得ることができる。ここで、高光学純度とは、好ましくは80% ee以上、より好ましくは85% ee以上、さらにより好ましくは90% ee以上、またさらにより好ましくは95% ee以上の光学純度であることをいう。

10 < α -アミノ酸の製造方法 >

本発明の別の局面では、本発明は、光学活性な α -アミノ酸の製造方法を提供する。

すなわち、本発明においては、上記の方法により得られた光学活性な式 (I V) の化合物 (光学活性な α -アミノ酸誘導体) を用いて、例えば、
15 下のいずれかの手順を行うことにより、光学活性な α -アミノ酸を製造することができる。

第一の方法では、まず、上記の方法により得られた光学活性な式 (I V) の化合物 (光学活性な α -アミノ酸誘導体) を構成するイミノ基 ($\text{R}^1\text{R}^2\text{C}=\text{N}-$) 部分が酸性条件下で加水分解される (イミンの酸性加水分解工程)。このイミンの酸性加水分解工程に用いられる酸の例としては、無機酸 (例えば、塩酸またはリン酸) あるいは3塩基酸を含む有機酸 (例えば、酢酸、クエン酸、トシル酸) が挙げられる。このイミンの酸性加水分解工程はまた、具体的には、適切な媒体 (例えば、テトラヒドロフランまたはトルエン) 中、式 (V I) の化合物を、上記酸の水溶液を用いて適切な温度 (例えば、室温) にて処理することによって進行する。その結果、酸性加水分解産物として末端アミノ基が遊離したアミノ酸のエステル誘導体を得ることがで
25

きる。

次いで、上記で得られたアミノ酸のエステル誘導体（酸性加水分解産物）は、必要に応じて、イミンの加水分解よりも強い酸性条件もしくは塩基性条件下、加水分解反応に供せられる。これにより、当該酸性加水分解物の末端
5 （すなわち、当該酸性加水分解産物を構成するエステル基（ $-\text{CO}_2\text{R}^{17}$ ））がカルボン酸となった目的のアミノ酸を得ることができる。

あるいは、第二の方法では、上記と反対の工程が採用される。すなわち、上記のアルキル化反応によって得られた光学活性な式（V I）の化合物（光学活性な α -アミノ酸誘導体）を構成するエステル基（ $-\text{CO}_2\text{R}^{17}$ ）を、
10 最初に塩基性条件下で加水分解する（エステルの塩基性加水分解工程）。このエステルの塩基性加水分解工程には、水酸化ナトリウム水溶液などのアルカリ水溶液が用いられ得る。このような加水分解を行うことにより、式（V I）の化合物の末端（すなわち、当該式（V I）の化合物を構成するエステル基（ $-\text{CO}_2\text{R}^{17}$ ））がカルボン酸となった塩基性加水分解産物を得ること
15 ができる。

次いで、上記で得られた塩基性加水分解産物のイミノ基（ $\text{R}^{14}\text{R}^{15}\text{C}=\text{N}-$ ）部分を酸性条件下に加水分解する（イミンの酸性加水分解工程）。このイミンの酸性加水分解工程に用いられる酸の例としては、無機酸（例えば、塩酸、リン酸、硫酸）あるいは3塩基酸を含む有機酸（例えば、酢酸、クエン酸）が挙げられる。このイミンの酸性加水分解工程は、具体的には、適切な媒体（例えば、テトラヒドロフランまたはトルエン）中、上記塩基性加水分解産物を、上記酸の水溶液を用いて適切な温度（例えば、室温）で処理することによって進行する。その結果、末端アミノ基が遊離した目的のアミノ酸を得ることができる。

25 本発明においては、式（V I）の化合物からアミノ酸を製造する場合、上記第一の方法または第二の方法のいずれが用いられてもよく、実際に製造す

るアミノ酸の具体的な構造その他製造条件によって当業者が任意に選択することができる。

このようにして、所望の光学活性な α -アミノ酸を、その構造上の制約を受けることなく、効率的かつ任意に製造することができる。

5

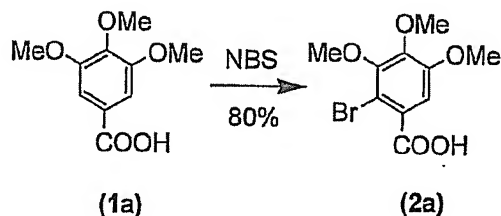
実施例

以下、本発明を実施例によって具体的に記述するが、これらによって本発明は制限されるものではない。

なお、以下の実施例においては、特に記載のない限り以下の条件にて測定した： ^1H NMRスペクトルを、JEOL JNM-FX400 (400 MHz) スペクトロメータ、およびJMT C-400/54/SS (400 MHz) スペクトロメータで測定した。反応生成物の光学純度は、高速液体クロマトグラフィー (HPLC) を、4.6 mm \times 25 cm Daicel Chiralcel OD、OD-H、AD、またはAD-Hを用いて、Shimadzu 10装置またはWATERS 2690装置で測定した。反応の進行は、薄層クロマトグラフィー (TLC) は、Merck precoated TLCプレート (シリカゲル60 GF254, 0.25 mm) を用いてモニタリングした。

20 <参考例1：4級アンモニウム塩の合成のための出発物質（化合物2a）の合成>

25



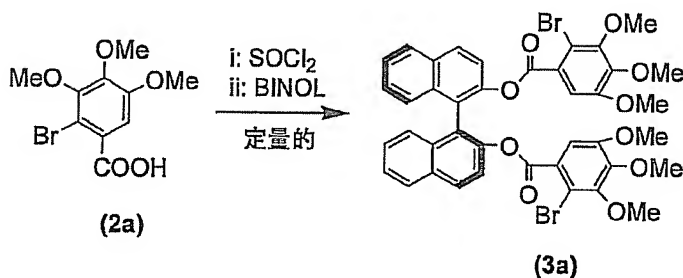
3, 4, 5-トリメトキシ安息香酸 (化合物 1 a) (21.22 g, 100 mmol) の CHCl_3 (200 mL) 溶液に、N-ブロモスクシンイミド (NBS) (21.36 g, 120 mmol) を添加した。この溶液を還流下で8時間加熱した。次いで、 CHCl_3 を減圧下で除去し、残渣を1 NのNaOH溶液 (150 mL) に溶解した。 CHCl_3 (15 mL) で3回洗淨した後、このアルカリ溶液を濃塩酸で酸性にした。得られた沈殿物を濾取し、1 NのHClで洗淨し、乾燥させて、標題の化合物 2 a (2-ブローモ-3, 4, 5-トリメトキシ安息香酸) を得た (23.3 g, 80 mmol / 収率: 80%)。得られた化合物 2 a のNMRスペクトルを表1に示す。

表 1

化合物2aのNMRスペクトル
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ 7.40 (1H, s, Ar-H), 3.97 (3H, s, OCH_3), 3.91 (3H, s, OCH_3), 3.90 (3H, s, OCH_3).

<参考例 2 : 4級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 3 a)

の合成>



アルゴン雰囲気下、二口フラスコに参考例1で得た化合物 2 a (2.33 g, 8.0 mmol) および塩化チオニル SOCl_2 (6 mL) を仕込んだ。この反応混合物を還流下にて4時間加熱した。次いで、過剰の塩化チオニルを減圧下に留去した。残渣にTHF (15 mL)、ピリジン (1.5 mL) および (S)-1, 1'-ビス(2-ナフトール) (1.14 g, 4.0 mmol) を添加した。3時間還流した後、反応混合物に1 NのNaOH、次いで1 NのHClを加え、エーテルで抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥して、

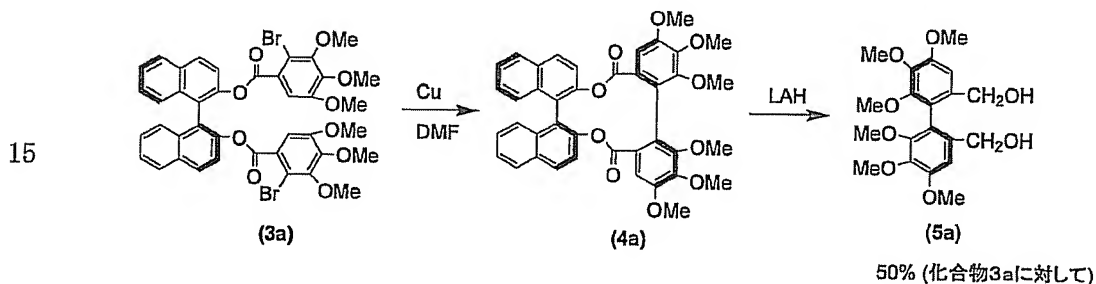
濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶出液として、エーテル／ヘキサン＝1／1）により精製し、標題の化合物3a（（S）-2, 2'-ビス（2-ブロモ-3, 4, 5-トリメトキシベンゾイル）-1, 1'-ビナフタレン）（3.33g, 4.0mmol）を定量的収率で得た。

5 得られた化合物3aのNMRスペクトルを表2に示す。

表2

化合物3aのNMRスペクトル
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ 8.04 (2H, d, $J = 8.8$ Hz, Nap-H), 7.94 (2H, d, $J = 8.4$ Hz, Nap-H), 7.63 (2H, d, $J = 8.8$ Hz, Nap-H), 7.48 (2H, m, Nap-H), 7.37 (4H, m, Nap-H), 6.31 (2H, s, Ar-H), 3.83 (6H, s, OCH_3), 3.73 (6H, s, OCH_3), 3.35 (6H, s, OCH_3).

<参考例3：4級アンモニウム塩の合成のための出発物質（化合物5a）の合成>



活性Cu粉末（11.8g, 184mmol）のDMF（60mL）懸濁液を激しく攪拌しながら、加熱下温和に還流させた。次いで、この混合物に参考例2で得られた化合物3a（3.33g, 4.0mmol）のDMF（50mL）溶液を、アルゴン雰囲気下、7時間かけて添加した。12時間加熱還流した後、反応混合物を濾過し、減圧下にてDMFを除去した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶出液として、ヘキサン／酢酸エチル＝2／1）で部分的に精製し、分子内カップリング生成物（化合物4a）と脱臭素化した副生成物との混合物を得た。これを、さらなる精製を施すことなく、次の還元工程にそのまま使用した。

20

25

LiAlH_4 (0.760 g, 16 mmol) を含む THF (15 mL) 懸濁液に、上で得た化合物 4a (部分精製品) を 0°C にて滴下した。反応混合物を室温で 4 時間攪拌した後、1 N の冷 HCl で注意深くクエンチし、酢酸エチルを加えて抽出した。溶媒を減圧留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として酢酸エチル) で精製して、標題の化合物 5a ((S)-4, 5, 6, 4', 5', 6'-ヘキサメトキシビフェニル-2, 2'-ジメタノール) を得た (0.790 g, 2.0 mmol / 収率: 50%)。得られた化合物 5a の NMR スペクトルを表 3 に示す。

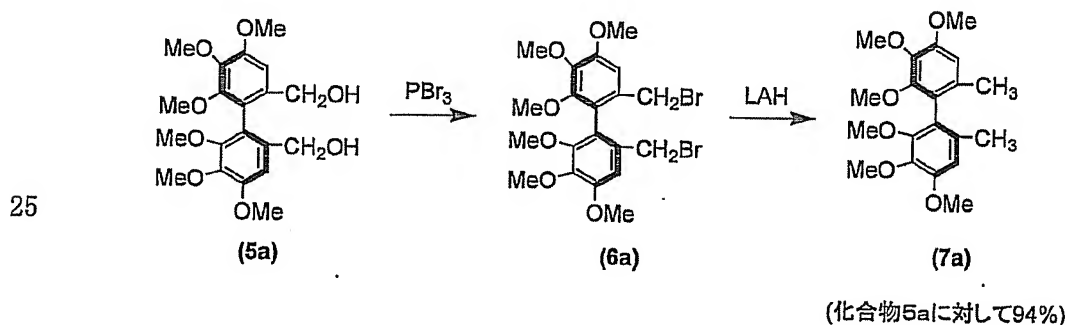
表 3

10

化合物 5a の NMR スペクトル
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ 6.89 (2H, s, Ar-H), 4.19 (4H, s, ArCH_2O), 3.94 (6H, s, OCH_3), 3.89 (6H, s, OCH_3), 3.68 (6H, s, OCH_3), 2.91 (2H, s, OH).

鏡像体過剰率を HPLC 分析により測定した (Daicel Chiral cell OD, ヘキサン/2-プロパノール = 8 : 1, 流速 = 0.5 mL / 分, 保持時間: R 体 = 23.1 分, S 体 = 35.2 分)。絶対配置を、当該保持時間と、公知の手段 (J. Org. Chem., 2003, 68, 9533) により別途合成した標品の保持時間との比較により決定した。

<参考例 4 : 4 級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 7a) の合成>



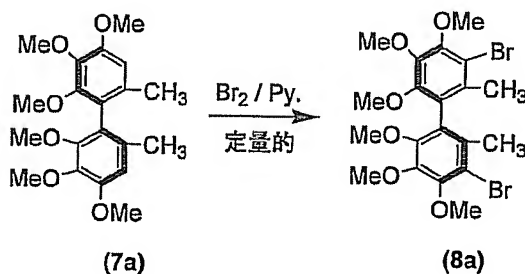
参考例 3 で得られた化合物 5 a (0.790 g, 2.0 mmol) の CH_2Cl_2 (5 mL) 溶液に、三臭化リン (0.380 mL, 4.0 mmol) を 0℃ にて添加した。反応混合物を室温で 1 時間攪拌した。次いで、これに水を加え、エーテルで抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥し、濃縮して、化合物 6 a ((S)-4, 5, 6, 4', 5', 6'-ヘキサメトキシビフェニル-2, 2'-ジメチルプロミド) を得た。これをさらに精製することなく、次の還元工程に用いた。

LiAlH_4 (0.190 g, 4.0 mmol) の THF 懸濁液 (15 mL) にを含むに 0℃ にて、上記で得られた化合物 6 a を添加した。反応混合物を室温で 4 時間攪拌した。1 N の冷 HCl で注意深くクエンチした後、酢酸エチルで抽出した。溶媒を減圧留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、ヘキサン/酢酸エチル = 3/1) で精製して、標題の化合物 7 a ((S)-4, 5, 6, 4', 5', 6'-ヘキサメトキシビフェニル-2, 2'-ジメタン) を得た (0.690 g, 1.9 mmol / 収率: 94%)。得られた化合物 7 a の NMR スペクトルを表 4 に示す。

表 4

化合物 7a の NMR スペクトル	
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ	6.60 (2H, s, Ar-H), 3.88 (6H, s, OCH_3), 3.87 (6H, s, OCH_3), 3.68 (6H, s, OCH_3), 1.95 (6H, s, ArCH_3).

<参考例 5 : 4 級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 8 a) の合成>

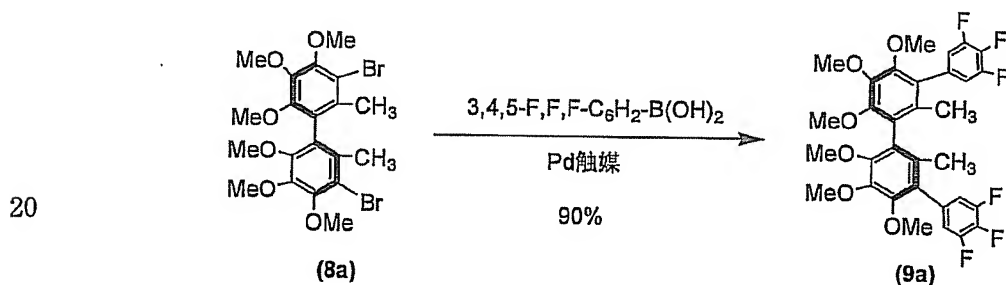


参考例4で得られた化合物7a (0.690g, 1.88mmol) およ
びピリジン (0.760mL, 9.4mmol) のCHCl₃ (5mL) 溶
液に、臭素 (0.480mL, 9.4mmol) を0℃にて滴下した。30
分間攪拌した後、反応混合物を飽和Na₂SO₃水溶液に注ぎ、エーテルで抽
5 出した。合わせた有機層を1NのHClで洗浄し、濃縮した。残渣をシリカ
ゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、ヘキサン/酢酸エチル=3
/1) で精製し、標題の化合物8a ((S)-3,3'-ジブromo-4,5,
6,4',5',6'-ヘキサメトキシビフェニル-2,2'-ジメタン)
(0.980g, 1.88mmol) を定量的収率で得た。得られた化合物
10 8aのNMRスペクトルを表5に示す。

表5

化合物8aのNMRスペクトル
400 MHz ¹ H NMR (CDCl ₃) δ 3.96 (6H, s, OCH ₃), 3.91 (6H, s, OCH ₃), 3.65 (6H, s, OCH ₃), 2.02 (6H, s, ArCH ₃).

15 <参考例6：4級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物9a)
の合成>



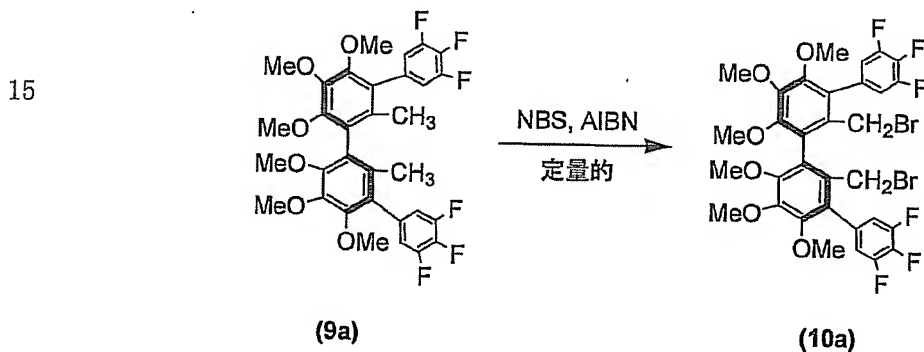
参考例5で得られた化合物8a (0.521g, 1.0mmol)、3,
4,5-トリフルオロフェニルボロン酸 (0.704g, 4.0mmol)、
酢酸パラジウム (0.0449g, 0.20mmol)、トリーオートリル
25 ホスフィン (0.244g, 0.80mmol)、リン酸カリウムn水和物
(1.69g, 8.0mmol) およびTHF (10mL) の混合物を、ア

ルゴン雰囲気下 75℃で加熱、撹拌した。出発物質の消失を TLC で確認した後、懸濁液を濾過し、濾液を減圧下に濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶出液として、ヘキサン／酢酸エチル＝5／1）で精製して、標題の化合物 9a（（S）-3, 3'-ビス（3, 4, 5-トリフルオロフェニル）-4, 5, 6, 4', 5', 6'-ヘキサメトキシビフェニル-2, 2'-ジメタン）を得た（0.560 g, 0.90 mmol / 収率：90%）。得られた化合物 9a の NMR スペクトルを表 6 に示す。

表 6

化合物 9a の NMR スペクトル
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3): δ 6.88 (4H, m, Ar-H), 3.92 (6H, s, OCH_3), 3.74 (6H, s, OCH_3), 3.71 (6H, s, OCH_3), 1.67 (6H, s, ArCH_3).

<参考例 7：4 級アンモニウム塩の合成のための出発物質（化合物 10a）の合成>



20 参考例 6 で得られた化合物 9a（0.560 g, 0.90 mmol）、N-ブロモスクイニンイミド（0.352 g, 1.98 mmol）および 2, 2'-アゾビスイソブチロニトリル（AIBN; 0.0148 g, 0.09 mmol）のベンゼン（5 mL）溶液を、80℃で 4 時間加熱した。飽和 Na_2SO_3 溶液を加えて反応をクエンチし、エーテルで抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶出液として、ヘキサン／酢酸エチル＝5／1）で精製して、標題の

25

化合物10a ((S)-3,3'-ビス(3,4,5-トリフルオロフェニル)-4,5,6,4',5',6'-ヘキサメトキシビフェニル-2,2'-ジメチルプロミド) (0.702 g, 0.9 mmol) を定量的収率で得た。得られた化合物10aのNMRスペクトルを表7に示す。

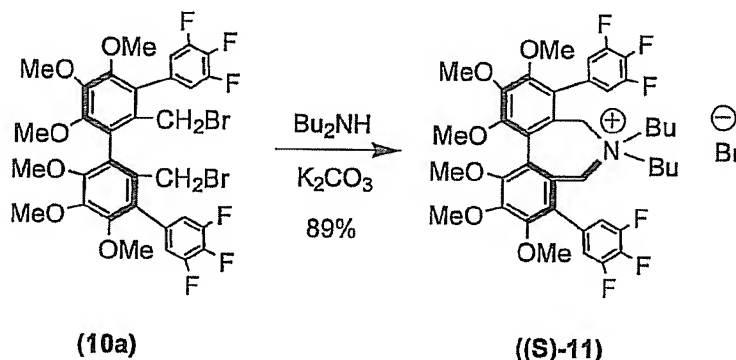
5

表7

化合物10aのNMRスペクトル
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ 7.08 (2H, s, Ar-H), 7.00 (2H, s, Ar-H), 3.95 (10H, m, OCH_3 , ArCH_2), 3.87 (6H, s, OCH_3), 3.73 (6H, s, OCH_3).

<実施例1：4級アンモニウム塩 ((S)-11) の合成>

10



15

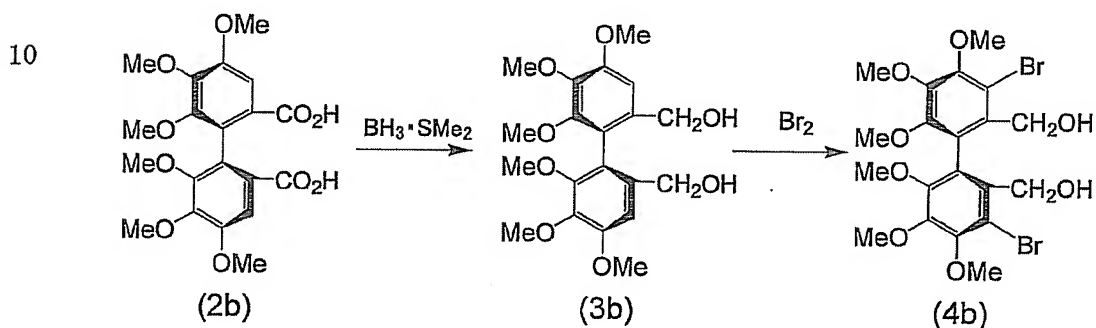
参考例7で得られた化合物10a (0.156 g, 0.20 mmol) と炭酸カリウム (0.0553 g, 0.40 mmol) とのアセトニトリル懸濁液 (5 mL) に、アルゴン雰囲気下にてジブチルアミン (0.067 mL, 0.40 mmol) を添加した。この反応混合物を80℃で10時間加熱した。次いで、これを1NのHBr水溶液中に注ぎ、 CH_2Cl_2 で抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥して、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、メタノール/ CH_2Cl_2 =1/10) で精製して、標題の光学活性な4級アンモニウムブロミド (化合物(S)-11) (S体) を得た (0.148 g, 0.178 mmol/収率: 89%)。なお、R体についても、上記と同様の手順を用いて合成することができる。本実施例で得られた化合物(S)-11のNMRスペクトルを表8に示す。

25

表 8

実施例1で得られた化合物(S)-11のNMRスペクトル	
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ	7.27 (2H, s, Ar-H), 7.08 (2H, s, Ar-H), 4.33 (2H, d, $J = 12.8$ Hz, ArCH_2), 4.04 (6H, s, OCH_3), 3.90 (8H, m, OCH_3 , ArCH_2), 3.75 (6H, s, OCH_3), 2.97 (2H, m, NCH_2), 2.78 (2H, m, NCH_2), 1.86 (4H, m, CH_2), 1.09 (2H, m, CH_2), 0.77 (6H, dd, $J = 7.2, 7.2$ Hz, CH_3), 0.23 (2H, m, CH_2).

<参考例 8 : 4 級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 4 b) の合成>



15

オウ. ティ. シュミット (O. T. Schmidt) らの方法 (O. T. Schmidt, K. Demmler, Justus Liebigs Ann. Chem., 1952, 576, 85) を用いて得た (S) - 4, 5, 6, 4', 5', 6' -ヘキサメトキシビフェニル-2, 2' -ジカルボン酸 (2 b) (0. 422 g, 1. 0 mmol) と $\text{B}(\text{OMe})_3$ (2 mL) との THF 溶液 (4 mL) に、 $\text{BH}_3 \cdot \text{Me}_2\text{S}$ の THF 溶液 (4. 0 mL, 1. 0 M, 4. 0 mmol) を、アルゴン雰囲気下、0℃にて滴下した。次いで反応温度を室温まで上昇させ、攪拌を5時間継続した。メタノール (1 mL) をゆっくりと添加して、反応をクエンチした。溶媒を減圧留去した後、残渣に1 Nの HCl を添加し、酢酸エチルで抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、減圧濃縮した。残渣を、ピリジン (0. 57 mL, 7. 0 mmol) の THF 溶液 (5 mL) に移した。この混合物を -2.0℃まで

20

25

冷却し、臭素 (0.36 mL, 7.0 mmol) を添加した。添加後、反応温度を 0℃まで上昇させ、攪拌を 1 時間継続した。反応混合物を飽和 Na_2SO_3 水溶液に注ぎ、酢酸エチルで抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥し、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、
 5 ヘキサン/酢酸エチル = 1/1) で精製して、標題の化合物 4b ((S)-3,3'-ジブromo-4,5,6,4',5',6'-ヘキサメトキシビフェニル-2,2'-ジメタノール) を得た (524 mg, 0.95 mmol / 収率: 95%)。得られた化合物 4b の物性データを表 9 に示す。

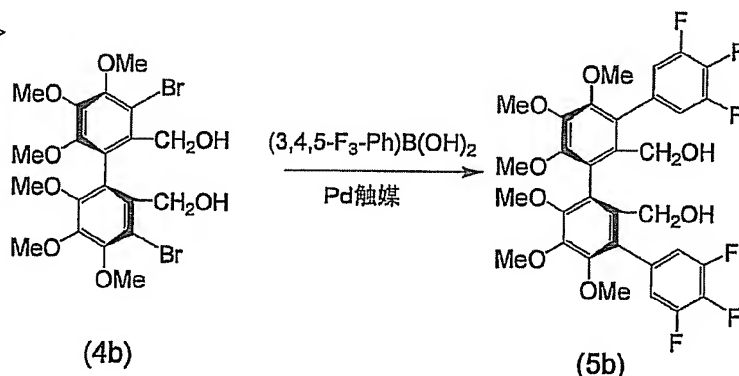
表 9

10	化合物 4b の物性データ
	^1H NMR (400 MHz, CDCl_3) δ 4.56 (2H, d, $J = 12.0$ Hz, ArCH_2), 4.18 (2H, d, $J = 12.0$ Hz, ArCH_2), 3.98 (6H, s, OCH_3), 3.94 (6H, s, OCH_3), 3.66 (6H, s, OCH_3), 3.34 (2H, s, OH);
	^{13}C NMR (100 MHz, CDCl_3) δ 151.15, 150.32, 146.54, 134.10, 126.85, 115.65, 62.08, 60.99, 60.97, 60.62.
	IR (ニート) 3292, 2939, 1458, 1388, 1313, 1088, 1005 cm^{-1} .
15	HRMS (ESI-TOF) $\text{C}_{20}\text{H}_{24}\text{Br}_2\text{O}_8 (\text{Na}^+)$ としての計算値 572.9730, 実測値 572.9723.
	$[\alpha]_D^{25} -7.17^\circ$ (c 1.00, CHCl_3).

<参考例 9 : 4 級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 5b)>

の合成>

20



25

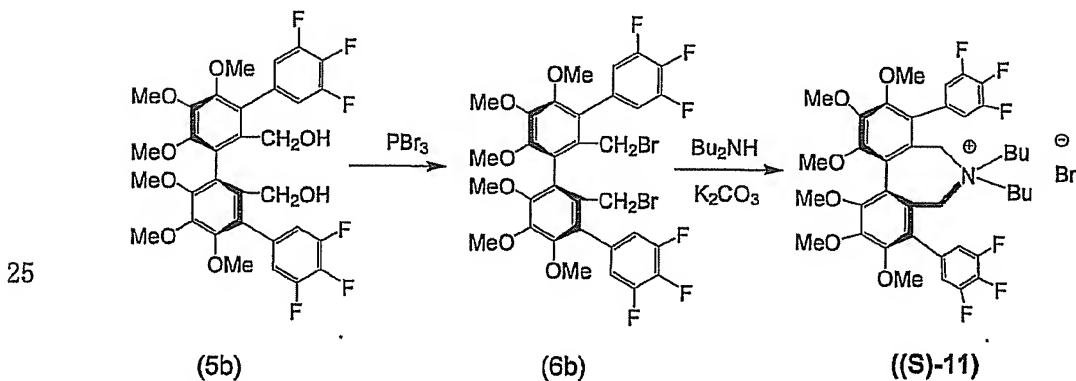
参考例 8 で得られた化合物 4b (0.276 g, 0.5 mmol)、3,4,5-トリフルオロフェニルボロン酸 (0.440 g, 2.5 mmol)、

酢酸パラジウム (0.0225 g, 0.10 mmol)、トリ-*o*-トリル
ホスフィン (0.122 g, 0.40 mmol)、リン酸カリウム *n* 水和物
(1.056 g, 5.0 mmol) および THF (5 mL) の混合物を、ア
ルゴン雰囲気下、88℃にて加熱した。出発物質の消失を TLC で確認した
5 後、懸濁液を濾過し、濾液を減圧下に濃縮した。残渣をシリカゲルカラムク
ロマトグラフィー (溶出液として、ヘキサン/酢酸エチル=2/1) により
精製し、標題の化合物 5b ((*S*)-3, 3'-ビス(3, 4, 5-トリフ
ルオロフェニル)-4, 5, 6, 4', 5', 6'-ヘキサメトキシビフェ
ニル-2, 2'-ジメタノール) を得た (0.255 g, 0.39 mmol
10 /収率 78%)。得られた化合物 5b の物性データを表 10 に示す。

表 10

化合物5bの物性データ
¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.09 (4H, m, Ar-H), 3.92-4.02 (10H, m, OCH ₃ , ArCH ₂), 3.76 (6H, s, OCH ₃), 3.71 (6H, s, OCH ₃), 3.19 (2H, s, OH).
¹³ C NMR (100 MHz, CDCl ₃) δ 151.11, 150.74, 150.27 (ddd, <i>J</i> _{C-F} = 250.6, 9.9, 4.1 Hz), 138.91 (dt, <i>J</i> _{C-F} = 252.2, 15.7 Hz), 133.11, 131.88 (dt, <i>J</i> _{C-F} = 5.8, 8.2 Hz), 130.26, 126.23, 114.71 (m), 61.03, 60.77, 60.72, 59.60.
IR (ニート) 3219, 2943, 1530, 1458, 1404, 1308, 1041 cm ⁻¹ .
HRMS (ESI-TOF) C ₃₂ H ₂₈ F ₆ O ₈ (Na ⁺) としての計算値 677.1581, 実測値 677.1583.
[α] _D ²⁴ +43.79° (c 1.00, CHCl ₃).

20 <実施例 2 : 4 級アンモニウム塩 ((*S*)-11) の合成>

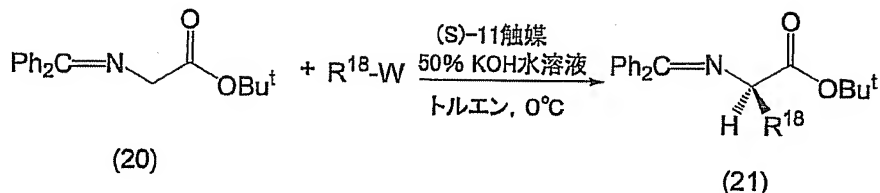


参考例9で得られた化合物5b (0.131g, 0.2mmol) のCH₂Cl₂ (5mL) 溶液に、0℃にて三臭化リン (0.038mL, 0.4mmol) を添加した。反応混合物を室温で1時間攪拌した。次いで、これを水でクエンチし、エーテルで抽出した。有機層を食塩水で洗浄し、Na₂SO₄で乾燥し、減圧濃縮して、粗製の化合物6bを得た。

次に、上記の粗製化合物6bを、アルゴン雰囲気下、炭酸カリウム (0.0553g, 0.40mmol) とジブチルアミン (0.067mL, 0.40mmol) とのアセトニトリル懸濁液 (5mL) に移した。次いで、この混合物を80℃で10時間加熱した。反応混合物を1NのHBrに注いでクエンチし、CH₂Cl₂で抽出した。有機層をNa₂SO₄で乾燥し、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、メタノール/CH₂Cl₂=1/10) により精製して、標題の光学活性な4級アンモニウムブロミド (化合物(S)-11) (S体) を得た (0.153g, 0.184mmol/収率: 92%)。なお、R体についても、上記と同様の手順を用いて合成することができる。本実施例で得られた化合物(S)-11の物性データを表11に示す。

表 1 1

実施例2で得られた化合物(S)-11の物性データ
¹ H NMR (400 MHz, CDCl ₃) δ 7.27 (2H, m, Ar-H), 7.08 (2H, m, Ar-H), 4.33 (2H, d, J = 12.8 Hz, ArCH ₂), 4.04 (6H, s, OCH ₃), 3.90 (8H, m, OCH ₃ , ArCH ₂), 3.75 (6H, s, OCH ₃), 2.97 (2H, m, NCH ₂), 2.78 (2H, m, NCH ₂), 1.86 (4H, m, CH ₂), 1.09 (2H, m, CH ₂), 0.77 (6H, dd, J = 7.2, 7.2 Hz, CH ₃), 0.23 (2H, m, CH ₂).
¹³ C NMR (100 MHz, CDCl ₃) δ 152.12, 151.75, 150.68 (ddd, J _{C-F} = 253.0, 10.7, 4.1 Hz), 139.28 (dt, J _{C-F} = 255.5, 14.9 Hz), 130.21 (dt, J _{C-F} = 4.9, 7.4 Hz), 129.80, 126.54, 119.98, 115.48 (m), 61.58, 61.14, 60.95, 57.69, 57.15, 24.30, 19.37, 13.28.
IR (ニート) 2962, 2943, 1530, 1460, 1400, 1041(cm ⁻¹).
HRMS (ESI-TOF) [C ₄₀ H ₄₄ F ₆ NO ₆] ⁺ としての計算値748.3067, 実測値748.3088.
[α] _D ²⁴ -121.78° (c 1.00, CHCl ₃).

<実施例3：グリシンの α -ベンジル化の確認(1)>

50% KOH水溶液 (1 mL) と N-(ビフェニルメチレン) グリシン tert-ブチルエステル (化合物 20) (88.6 mg, 0.3 mmol) のトルエン溶液 (1.5 mL) との混合物に、実施例 2 で得られた化合物 (S)-11 (1 モル%; 相間移動触媒) と上記式 $\text{R}^{18}\text{-W}$ で表される化合物としてベンジルブロミド (1.2 当量, 43 μL , 0.36 mmol) との混合物を加え、アルゴン雰囲気下、 0°C にて激しく攪拌した。反応の終了を TLC で確認した後、反応混合物を水中に注ぎ、エーテルで抽出した。有機抽出物を食塩水で洗浄し、 Na_2SO_4 で乾燥した。溶媒を減圧留去した後、残渣のオイルをシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、エーテル/ヘキサン=1/10) で精製して、対応する化合物 21 ((R)-tert-ブチル N-(ジフェニルメチレン) フェニルアラニン) を得た (110 mg, 0.285 mmol / 収率: 95%)。本実施例で得られた化合物 21 の光学純度を、HPLC にて分析した [Daicel Chiralcel OD; 溶離液: ヘキサン/2-プロパノール=100/1、流速 0.5 mL/分; 保持時間: (R) 体=14.8 分、(S) 体=28.2 分]。本実施例で得られた化合物 21 の光学純度を以下の表 12 に示す。

<実施例4：グリシンの α -ベンジル化の確認(2)>

反応温度を 0°C とする代わりに 25°C に設定し、かつ反応時間を 6 時間とする代わりに 4.5 時間に設定したこと以外は、実施例 3 と同様にして対応する化合物 21 を得た。さらに、本実施例で得られた化合物 21 の光学純度

を実施例 3 と同様にして分析した。本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純度を以下の表 1 2 に示す。

<実施例 5 : グリシンの α -ベンジル化の確認 (3) >

5 相間移動触媒 ((S) - 1 1) を 1 モル% の代わりに 0. 1 モル% 使用し、
反応温度を 0℃ とする代わりに 2 5℃ に設定し、かつ反応時間を 6 時間とする
代わりに 1 1 時間に設定したこと以外は、実施例 3 と同様にして対応する
化合物 2 1 を得た。さらに、本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純度を実
10 施例 3 と同様にして分析した。本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純度を
以下の表 1 2 に示す。

<実施例 6 : グリシンの α -ベンジル化の確認 (4) >

相間移動触媒 ((S) - 1 1) を 1 モル% の代わりに 0. 0 5 モル% 使用
し、反応温度を 0℃ とする代わりに 2 5℃ に設定し、かつ反応時間を 6 時間
15 とする代わりに 2 0 時間に設定したこと以外は、実施例 3 と同様にして対応
する化合物 2 1 を得た。さらに、本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純度
を実施例 3 と同様にして分析した。本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純
度を以下の表 1 2 に示す。

20 <実施例 7 : グリシンの α -ベンジル化の確認 (5) >

相間移動触媒 ((S) - 1 1) を 1 モル% の代わりに 0. 0 1 モル% 使用
し、反応温度を 0℃ とする代わりに 2 5℃ に設定し、かつ反応時間を 6 時間
とする代わりに 2 4 時間に設定したこと以外は、実施例 3 と同様にして対応
する化合物 2 1 を得た。さらに、本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純度
25 を実施例 3 と同様にして分析した。本実施例で得られた化合物 2 1 の光学純
度を以下の表 1 2 に示す。

<実施例8：グリシンの α -ベンジル化の確認(6)>

相間移動触媒((S)-11)を1モル%の代わりに0.5モル%使用し、上記式 $R^{18}-W$ で表される化合物としてベンジルブロミドの代わりに、臭化アリルを化合物20に対し1.2当量用い、かつ反応時間を6時間とする代わりに5時間に設定したこと以外は、実施例3と同様にして対応する化合物21を得た。さらに、本実施例で得られた化合物21の光学純度を実施例3と同様にして分析した。本実施例で得られた化合物21の光学純度を以下の表12に示す。

10 <実施例9：グリシンの α -ベンジル化の確認(7)>

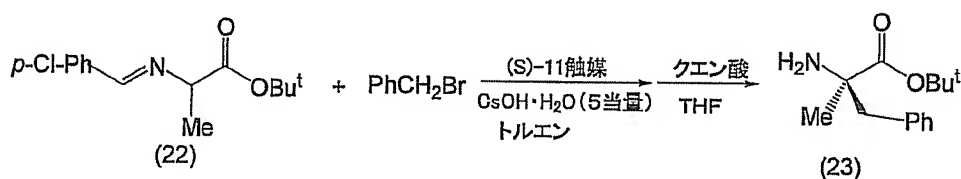
相間移動触媒((S)-11)を1モル%の代わりに0.1モル%使用し、上記式 $R^{18}-W$ で表される化合物としてベンジルブロミドの代わりに、ヨウ化エチル(8当量、過剰量として使用)を用い、反応温度を0℃とする代わりに25℃に設定し、かつ反応時間を6時間とする代わりに36時間に設定したこと以外は、実施例3と同様にして対応する化合物21を得た。さらに、本実施例で得られた化合物21の光学純度を実施例3と同様にして分析した。本実施例で得られた化合物21の光学純度を以下の表12に示す。

表12

	触媒((S)-11) の使用量(モ ル%)	$R^{18}-W$	反応条件		生成物(化合物21)		
			温度(℃)	時間	収率(%)	光学純度	絶対配置
				(時間)		(%ee)	
実施例3	1	PhCH ₂ Br	0	6	95	98	R体
実施例4	1	PhCH ₂ Br	25	4.5	97	97	R体
実施例5	0.1	PhCH ₂ Br	25	11	96	97	R体
実施例6	0.05	PhCH ₂ Br	25	20	94	97	R体
実施例7	0.01	PhCH ₂ Br	25	24	95	96	R体
実施例8	0.5	CH ₂ =CHCH ₂ Br	0	5	99	96	R体
実施例9	0.1	CH ₃ CH ₂ I	25	36	80	94	R体

表 1 2 に示されるように、実施例 3 から 9 のいずれの条件を用いても、対応する上記化合物 2 1 を高収率かつ優れた光学純度で製造することができたことがわかる。さらに、例えば、実施例 6 または 7 の結果のように、使用する触媒量を著しく低下させたとしても、得られる化合物 2 1 の収率および光学純度は、他の実施例の結果と比較しても大きな変動がない。このことから、本発明に用いられる相間移動触媒（例えば、(S)-11）は、より少ない量でアミノ酸誘導体を効率よく製造することができることがわかる。またさらに、実施例 4 から 7 および 9 に示されるように、反応温度は、必ずしも実施例 3 および 8 のような比較的低温下にて行う必要もなく、工業的製造がより容易となる温度（例えば、室温）でも反応が充分進行し、得られる化合物 2 1 の収率および光学純度にも大きな変動を生じていなかった。このことから、本発明の方法は、工業的製造の観点から見ても、極めて有用であることがわかる。

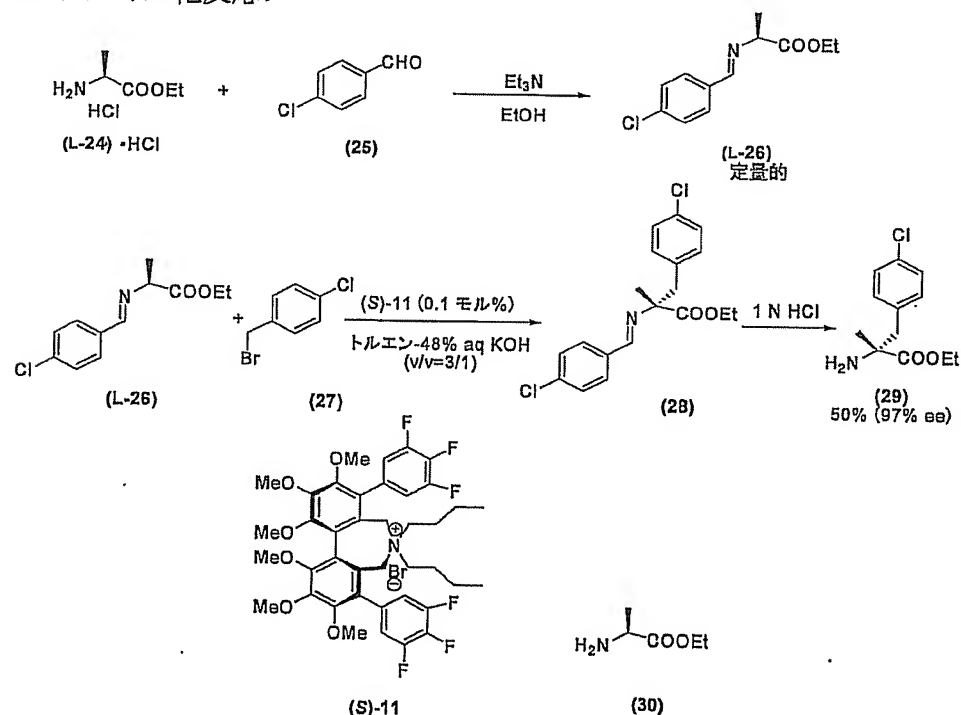
<実施例 10 : アラニンの α -ベンジル化の確認>



tert-ブチルエステルアルジミンシッフ塩基 (22) (80.3 mg, 0.3 mmol) のトルエン溶液 (1.5 mL) と、実施例 2 で得られた化合物 (S)-11 (1 モル%; 相間移動触媒) と、ベンジルブロミド (43 μL , 0.36 mmol) と、 $\text{CsOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ (252 mg, 1.5 mmol) との混合物を、アルゴン雰囲気下、0°C にて激しく攪拌した。反応の進行を TLC により追跡した。反応終了後、この混合物を水中に注ぎ、 CH_2Cl_2 で抽出した。溶媒を減圧濃縮し、残渣を THF (5 mL) に溶解した。0.5 M のクエン酸 (5 mL) を添加し、混合物を室温で 1 時間攪拌した。

THFを減圧下に留去した後、水相をヘキサンで洗浄した。次いで、固体の Na_2CO_3 を添加して塩基性にし、 CH_2Cl_2 で抽出した。有機抽出物を Na_2SO_4 で乾燥した。溶媒を減圧下に留去し、残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー（溶出液として、酢酸エチル／ヘキサン＝1／2）により精製して、標題のアルキル化化合物 23 を得た（37 mg, 0.159 mmol）。なお、本実施例では精製の際に行った減圧濃縮の過程で、得られた化合物 23 の一部が揮発したため、収率は 53% であった。本実施例で得られた化合物 23 の光学純度を、HPLC にて分析した [Daicel Chiralcel AD-H; 溶離液：ヘキサン／2-プロパノール＝30／1、流速 0.5 mL／分；保持時間：(R) 体＝12.6 分、(S) 体＝19.4 分]。本実施例で得られた化合物 23 の光学純度は 99% ee であった。

<実施例 11：48%水酸化カリウム水溶液を用いるアラニンエチルエステルのアルキル化反応>



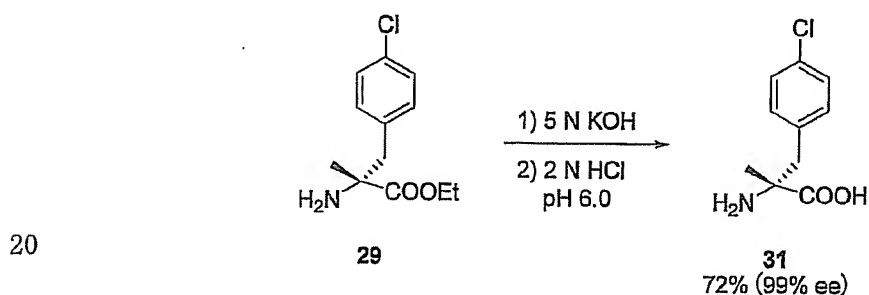
L-アラニンエチルエステル（化合物L-24）の塩酸塩（23.0 g, 150 mmol）をエタノール（140 mL）に添加し、さらにトリエチルアミン（15.2 g, 150 mmol）を添加して攪拌した。60℃の湯浴で溶解したp-クロロベンズアルデヒド（化合物25）に溶解させ、室温まで放冷し、これを化合物L-24のエタノール溶液に滴下した。室温で2時間攪拌した後、エタノールを減圧留去した。そこに半飽和の食塩水（40 mL）を加え、酢酸エチル（160 mL×1）で抽出した。酢酸エチル層を、飽和食塩水（20 mL）で洗浄し、硫酸ナトリウムを敷いたろ紙にて濾過した。ろ液を減圧下で濃縮して、L-アラニンエチルエステル-p-クロロベンジルシッフ塩基（化合物L-26）（36.75 g）を定量的収率で得た。

次いで、上記で得られたシッフ塩基（化合物L-26）（1.20 mg, 5.01 mmol）、4-クロロベンジルブロミド（化合物27）（1.23 g, 5.99 mmol）、および実施例2で得られた化合物（S）-11（0.1 mol%；相間移動触媒）（4.2 mg, 5.1 μmol）を、トルエン（20 mL）に添加し、氷・塩冷却下で激しく攪拌した（1000 rpm）。内温が-5℃になったことを確認した後、反応混合物に、48%水酸化カリウム水溶液（8.80 g（当該水溶液として））を添加した。その後、内温を-1℃~-5℃の間に保持して4時間攪拌した。トルエン層中で上記シッフ塩基（化合物L-26）が分解して生じる化合物30の消失をTLC（ヘキサン/酢酸エチル/トリエチルアミン=5/5/0.1, ニンヒドリン発色, 化合物30のR_f値0.1）で観察することによって、反応の終了を確認した。次いで、水（20 mL）を添加し、分液によってトルエン層を分離した。水層をトルエン（20 mL×2）で抽出した。合わせたトルエン層を硫酸ナトリウムで乾燥し、減圧下に濃縮して、油状残渣としてアルキル化されたシッフ塩基（化合物28）を得た。

この残渣に1 Nの塩酸（10 mL）を添加し、室温で2時間攪拌した。ト

ルエン (20 mL × 3) で水層を洗浄し、発泡に気をつけながら、溶液が pH 11 以上 (ユニバーサル pH 試験紙で確認した) になるまで炭酸ナトリウムを添加した後、酢酸エチル (20 mL × 3) で抽出した。得られた酢酸エチル溶液を、硫酸ナトリウムで乾燥し、減圧下で濃縮して、標題の化合物 29 ((R) - α - メチル - 4 - クロロフェニルアラニンエチルエステル) (0.60 g, 収率 50%) を得た。本実施例で得られた化合物 29 の光学純度を、HPLC にて分析した [Daicel Chiralcel AD (4.6 mm φ × 25 cm) ; 溶離液 : ヘキサン / イソプロピルアルコール / ジエチルアミン = 99 / 1 / 0.1 ; 流速 0.5 mL / 分 ; 温度 = 室温 ; 検出器 UV 267.5 nm ; 保持時間 : (R) 体 = 24.7 分、(S) 体 = 26.3 分] 。本実施例で得られた化合物 29 の光学純度は 97% ee であった。

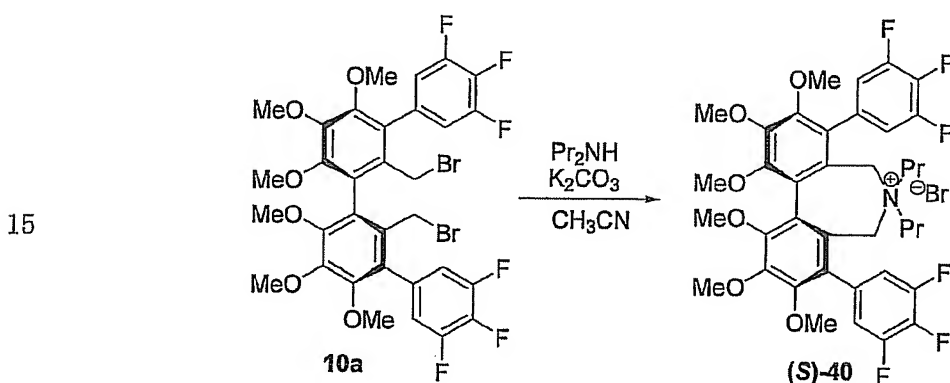
<実施例 12 : (R) - α - メチル - 4 - クロロフェニルアラニンエチルエステルの加水分解>



(R) - α - メチル - 4 - クロロフェニルアラニンエチルエステル (化合物 29) (0.35 g, 1.4 mmol、光学純度 97% ee) に 5 N の水酸化カリウム水溶液 (1 mL) を加え、室温で溶液が均一になるまで 2 時間攪拌して、2 N の塩酸を pH 6.0 になるまで加えた。白色の沈殿が生じたことを確認し、溶液を氷冷下で 30 分間攪拌を続け、白色の沈殿をろ取した。

50℃で3時間乾燥し、化合物31 ((R)- α -メチル-4-クロロフェニルアラニン) (0.22 g, 収率72%)を得た。本実施例で得られた化合物31の光学純度を、HPLCにて分析した [Sumika Sumichiral OA-5000 (4.6 mm ϕ \times 15 cm) ; 溶離液: メタノール/2 mM硫酸銅水溶液 = 30/70 ; 流速1.0 mL/分 ; 温度 = 37℃ ; 検出器UV 254 nm ; 保持時間: (S) 体 = 40.4分、(R) 体 = 57.2分]。本実施例で得られた化合物31の光学純度は99% eeであった。

10 <実施例13: 4級アンモニウム塩 (化合物 (S)-40) の合成>



参考例7で得られた化合物10a (15.6 mg, 0.02 mmol) と炭酸カリウム (6.9 mg, 0.05 mmol) とのアセトニトリル懸濁液 (3 mL) に、アルゴン雰囲気下にてジプロピルアミン (0.0137 mL, 0.1 mmol) を添加した。この反応混合物を80℃で10時間加熱した。次いで、これを1 NのHBr水溶液中に注ぎ、CH₂Cl₂で抽出した。有機層をNa₂SO₄で乾燥して、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー (溶出液として、メタノール/CH₂Cl₂ = 1/10) で精製して、標題の光学活性な4級アンモニウムブロミド (化合物 (S)-40)

(S体)を得た(14.6mg, 0.018mmol/収率:91%)。なお、R体についても、上記と同様の手順を用いて合成することができる。本実施例で得られた化合物(S)-40のNMRスペクトルを表13に示す。

表 1 3

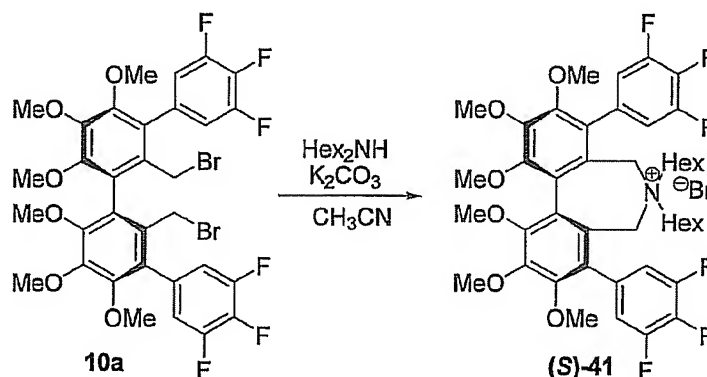
5

実施例13で得られた化合物(S)-40のNMRスペクトル	
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3)	δ 7.28 (2H, s, Ar-H), 7.09 (2H, s, Ar-H), 4.31 (2H, d, $J = 12.4$ Hz, ArCH_2), 4.04 (6H, s, OCH_3), 3.89 (8H, m, OCH_3 , ArCH_2), 3.77 (6H, s, OCH_3), 2.95 (2H, m, NCH_2), 2.75 (2H, m, NCH_2), 1.09 (2H, m, CH_2), 0.77 (6H, dd, $J = 7.2, 7.2$ Hz, CH_3), 0.25 (2H, m, CH_2).

10

<実施例14: 4級アンモニウム塩(化合物(S)-41)の合成>

15



20

参考例7で得られた化合物10a(15.6mg, 0.02mmol)と炭酸カリウム(6.9mg, 0.05mmol)とのアセトニトリル懸濁液(3mL)に、アルゴン雰囲気下にてジヘキシルアミン(0.0233mL, 0.1mmol)を添加した。この反応混合物を80℃で10時間加熱した。次いで、これを1NのHBr水溶液中に注ぎ、 CH_2Cl_2 で抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥して、減圧濃縮した。残渣をシリカゲルカラムクロマトグラフィー(溶出液として、メタノール/ $\text{CH}_2\text{Cl}_2 = 1/20$)で精製して、標題の光学活性な4級アンモニウムブロミド(化合物(S)-41)(S体)を得た(16mg, 0.018mmol/収率:90%)。なお、

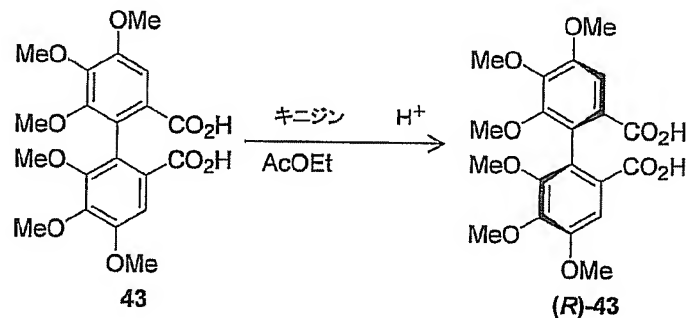
25

R体についても、上記と同様の手順を用いて合成することができる。本実施例で得られた化合物 (S) - 41 のNMRスペクトルを表14に示す。

表14

実施例14で得られた化合物(S)-41のNMRスペクトル	
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ	7.26 (2H, s, Ar-H), 7.07 (2H, s, Ar-H), 4.31 (2H, d, $J = 12.5$ Hz, ArCH_2), 4.05 (6H, s, OCH_3), 3.92 (8H, m, OCH_3 , ArCH_2), 3.75 (6H, s, OCH_3), 2.92 (2H, m, NCH_2), 2.74 (2H, m, NCH_2), 1.30-1.08 (14H, m, CH_2), 0.74 (6H, dd, $J = 7.1, 7.2$ Hz, CH_3), 0.25 (2H, m, CH_2).

<参考例10：4級アンモニウム塩の合成のための出発物質（化合物 (R) - 43）の合成>



ジェイ. デイ. ライツ (J.D.Reitze) らの方法 (J.D.Reitze, S.R.Przewl
oka, B.J.Shearer, Holzforschung, 2001, 55, 171) を用いて得た、4, 5,
6, 4', 5', 6' -ヘキサメトキシジフェン酸 (43) (21.12 g,
50 mmol) の酢酸エチル (160 mL) 溶液に、キニジン (16.22
g, 50 mmol) を室温にて添加した。反応混合物を1時間還流した後、
ゆっくりと0℃まで冷却した。析出した結晶を濾取し、酢酸エチルで洗浄し、
乾燥させて、4, 5, 6, 4', 5', 6' -ヘキサメトキシジフェン酸ビス
キニジン塩を得た (15.34 g)。これに酢酸エチル (50 mL) およ
び1NのHCl水溶液 (100 mL) を加え、室温で1時間攪拌した。酢酸

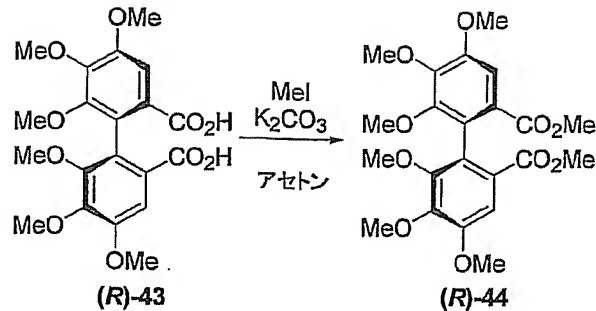
エチルで抽出し、 Na_2SO_4 で乾燥し、濃縮して、標題の化合物 (R) - 43 ((R) - 4, 5, 6, 4', 5', 6' - ヘキサメトキシジフェン酸) (5.97 g, 14.1 mmol / 収率: 28%) を得た。

また、先ほどの濾液を減圧濃縮し、残渣に85%含水メタノール (82 ml) および1Nの水酸化カリウム水溶液 (35 ml) を滴下した。これにキニジン (4.87 g, 15 mmol) を室温にて添加した。反応混合物を1時間還流した後、ゆっくりと0℃まで冷却した。析出した結晶を濾取し、85%含水メタノールで洗浄し、乾燥させて、4, 5, 6, 4', 5', 6' - ヘキサメトキシジフェン酸ビスキニジン塩を得た (15.84 g)。これに酢酸エチル (50 ml) および1NのHCl水溶液 (100 ml) を加え、室温で1時間攪拌した。酢酸エチルで抽出し、 Na_2SO_4 で乾燥し、濃縮して、化合物 (S) - 43 ((S) - 4, 5, 6, 4', 5', 6' - ヘキサメトキシジフェン酸) (4.92 g, 11.65 mmol / 収率: 23%) を得た。

鏡像体過剰率をHPLC分析により測定した (Daicel Chiralcel AD-H, ヘキサン/2-プロパノール/TFA=93:7:0.1, 流速=0.8 mL/分, 保持時間: (S) 体=26.3分, (R) 体=34.1分)。化合物 (R) - 43の光学純度は99% eeであった。また、化合物 (S) - 43の光学純度は99% eeであった。絶対配置を、当該保持時間と、公知の手段 (O.T.Schmidt, K.Demmler, Justus Liebigs Ann. Chem., 1952, 576, 85) により別途合成した標品の保持時間との比較により決定した。

<参考例 11: 4級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 (R) - 44) の合成>

5



10

参考例 10 で得られた化合物 (R) - 43 (0.84 g, 2 mmol) のアセトン (10 mL) 溶液に、炭酸カリウム (0.55 g, 8 mmol) およびヨウ化メチル (1.25 mL, 20 mmol) を添加した。この反応混合物を還流下にて 5 時間加熱した後、反応混合物に飽和 NaHCO_3 溶液を加え、酢酸エチルで抽出した。有機層を Na_2SO_4 で乾燥して、減圧濃縮した。標題の化合物 (R) - 44 ((R) - 4, 5, 6, 4', 5', 6' - ヘキサメトキシジフェン酸ジメチル) (0.90 g, 2 mmol) を定量的収率で得た。得られた化合物 (R) - 44 の NMR スペクトルを表 15 に示す。

15

表 15

化合物 (R) - 44 の NMR スペクトル
400 MHz ^1H NMR (CDCl_3) δ 7.37 (2H, s, Ar-H), 3.97 (12H, s, OCH_3), 3.94 (6H, s, OCH_3), 3.60 (6H, s, CO_2CH_3).

20

< 参考例 12 : 4 級アンモニウム塩の合成のための出発物質 (化合物 (R) - 45) の合成 >

25

